N° d'ordre : 68

THÈSE

PRÉSENTÉE

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE BESANÇON

POUR OBTENIR

LE TITRE DE DOCTEUR DE TROISIÈME CYCLE
(SPÉCIALITÉ MÉTROLOGIE)

PAR

Roger LIONNET

Structure hyperfine de la Raie 3-3 de l'Ammoniac
Etude théorique de sa résolution par un Maser à 2 cavités

SOUTENUE LE 23 FEV. 1968 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

MM.	**P. PLUVINAGE**	Président
	J. UEBERSFELD	Examinateurs
	L. GALATRY	
	M. OLIVIER	
	L. ARBEY	Membre Invité

N° d'ordre : 68

THÈSE

PRÉSENTÉE

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE BESANÇON

POUR OBTENIR

LE TITRE DE DOCTEUR DE TROISIÈME CYCLE
(SPÉCIALITÉ MÉTROLOGIE)

PAR

Roger LIONNET

Structure hyperfine de la Raie 3-3 de l'Ammoniac
Etude théorique de sa résolution par un Maser à 2 cavités

SOUTENUE LE 23 FEV. 1968 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

MM.	**P. PLUVINAGE**	Président
	J. UEBERSFELD	Examinateurs
	L. GALATRY	
	M. OLIVIER	
	L. ARBEY	Membre Invité

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41547627_0026

UNIVERSITE DE BESANCON
FACULTE DES SCIENCES

Doyen Honoraire : M. GLANGEAUD

Professeurs Honoraires : MM. BAILLAUD, DUFFIEUX, THIRY
TRILLAT, UEBERSFELD, VINCENSINI

Maître de Conférences Honoraire : M. GRANIER

DOYEN	M.	JACQUEMAIN	: Chimie Appliquée
ASSESSEUR	M.	THIEBAUT ...	: Géologie Minéralogie
PROFESSEURS	MM.	TRONCHET....	: Botanique
		CHATELET ...	: Mathématiques
		PERROT	: Chimie Générale
		PLUVINAGE...	: Physique Théorique
		DREYFUSS ...	: Géologie Minéralogie
		MESNAGE	: Chronométrie
		THEOBALD ...	: Paléontologie et Géologie stratigraphique
		QUANTIN	: Botanique
		NAHON	: Mécanique Générale
		CHALEAT	: Mécanique Appliquée
		RIPPLINGER..	: Physiologie animale
		BERNARD	: Chimie Physique
		RIGAL	: Mathématiques
		VIENOT	: Physique Générale
		GOMOT	: Zoologie
		ARBEY	: Astronomie
		GALATRY	: Physique
PROFESSEUR ASSOCIE	M.	DEFIX	: Mécanique Appliquée
PROFESSEURS SANS CHAIRE	MM.	POTIER.....	: Physique des Solides
		DEVIN	: Chimie Générale
	Mle	LEGRAND.....	: Botanique
	MM.	REAL	: Biologie Animale
		VALLEE.....	: Mathématiques Appliquées
		GOUARNE	: Mathématiques
		CERUTTI	: Chimie Appliquée
		BONNEAU	: Astronomie
MAITRES DE CONFERENCES	MM.	THEOBALD J.G.	: Spectroscopie Hertzienne
		PARIZET.....	: Mathématiques
		HARTMANN....	: Physique
		ROBERT.....	: Mathématiques
CHARGES D'ENSEIGNEMENT	MM.	REMOND	: Chronométrie
		MASSONIE....	: Mécanique Théorique
		HELLEGOUARCH	: Mathématiques
		BANTEGNIE ..	: Mathématiques
		MERIGOUX ...	: Physique
		MIELLOU	: Mathématiques
		OLIVIER	: Physique

CONSEILLER ADMINISTRATIF
UNIVERSITAIRE ..... : Monsieur LAMBERT

STRUCTURE HYPERFINE DE LA RAIE 3-3 de $N^{I4}H_3$

ETUDE THEORIQUE DE SA RESOLUTION PAR UN MASER à 2 CAVITES

L'étude théorique que nous présentons a pour but de préciser certains points relatifs aux travaux, sur les masers à ammoniac, effectués au Laboratoire de l'Horloge Atomique du Centre National de la Recherche Scientifique. Je voudrais remercier Monsieur le Directeur Général du Centre National de la Recherche Scientifique qui m'a autorisé à travailler dans ce Laboratoire.

Que Monsieur le Professeur UEBERSFELD, Sous-Directeur du Laboratoire de l'Horloge Atomique, trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance pour m'avoir proposé ce travail au sein de son Laboratoire.

Ce m'est un devoir agréable d'exprimer ici toute ma gratitude à Monsieur le Professeur ARBEY, Directeur de l'Observatoire de Besançon, dont la sollicitude et la compréhension m'ont permis de mener à bonne fin ce travail dans les conditions les plus favorables et qui a bien voulu accepter de faire partie de ce Jury.

Je voudrais remercier Monsieur le Professeur PLUVINAGE pour l'intérêt qu'il m'a témoigné et pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider ce Jury. J'adresse également mes remerciements à Monsieur le Professeur GALATRY pour avoir bien voulu examiner mon travail.

Parmi toutes les personnes qui m'ont apporté leur aide, je sais gré particulièrement à Monsieur OLIVIER, Chargé de Recherches au Centre National de la Recherche Scientifique, de m'avoir

constamment guidé et de m'avoir fait bénéficier de ses conseils.

Je n'aurais garde d'oublier le personnel du Laboratoire d'Informatique et particulièrement Monsieur JOCQUIN dont le dévouement m'a été d'un précieux secours et a rendu possible l'achèvement de ce travail. Je n'oublierai pas non plus Monsieur WUY dont la collaboration m'a été une aide efficace.

C'est à Madame CUENIN que revient le mérite d'avoir assuré avec compétence la tâche ardue de la dactylographie.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION

I^ère PARTIE

ETUDE DU SPECTRE DE L'AMMONIAC

CHAPITRE I - SPECTRE D'INVERSION ET STRUCTURE FINE : Page

1/ -Spectre d'inversion ..... : 1

2/ -Structure fine du spectre d'inversion ..... : 9

A - Etude de la rotation : quantification et règles de sélection -

B - Etude de la structure fine

CHAPITRE II - STRUCTURE HYPERFINE ..... : 15

1/ -Interaction Electrostatique ..... : 17

2/ -Calcul de l'Hamiltonien d'Interaction quadrupolaire ..... : 20

3/ -Calcul de l'Hamiltonien d'Interaction quadrupolaire appliqué à l'ammoniac..... : 24

4/ -Application à la raie d'inversion J = 3, K = 3 : 27

5/ -Intensités relatives des trois composantes quadrupolaires ..... : 30

II^ème PARTIE

ETUDE THEORIQUE DE LA RESOLUTION DES COMPOSANTES HYPERFINES PAR UN MASER à DEUX CAVITES

A - Les champs électriques, qui règnent dans les cavités 1 et 2, ont même amplitude et sont en phase :

1/ -Calcul de probabilité de transition ..... : 37

2/ -Application à la forme de la raie 3-3 ..... : 47

B - Etude des distorsions de la raie de résonance :

1/ -Calcul de la probabilité de transition dans le cas général où les champs électriques ont des amplitudes différentes et ne sont pas en phase.. : 49

2/ -Cas où les champs électriques sont d'amplitude égale et ne sont pas en phase ..... : 58

3/ -Cas où les champs électriques sont en phase, et ne sont pas d'amplitude égale ..... : 59

CONCLUSION

BIBLIOGRAPHIE

INTRODUCTION

L'étude qui suit s'insère dans le cadre d'une série de recherches, effectuées au Laboratoire de l'Horloge Atomique, sur l'effet Zeeman appliqué à l'ammoniac. Cet effet Zeeman, utilisé pour fournir un critère d'accord pour le maser fonctionnant en oscillateur, s'est avéré très compliqué et nous avons été conduits à envisager une étude spectroscopique de la raie 3-3 de la molécule d'ammoniac $N^{14}H_3$. Dans un premier temps, nous avons été amenés à étudier un système qui permettra l'observation de l'effet Zeeman sur chacune des composantes résolues.

Notre travail comporte essentiellement une étude théorique d'un système de type Ramsey, à 2 cavités, permettant la résolution des composantes hyperfines.

Cet exposé est précédé d'une première partie dans laquelle, d'une part, sont rappelées les données essentielles concernant la structure fine de l'ammoniac, d'autre part, est développée la théorie complète de la structure hyperfine.

PREMIERE PARTIE

ETUDE DU SPECTRE DE L'AMMONIAC

CHAPITRE I

SPECTRE D'INVERSION ET STRUCTURE FINE

La molécule d'ammoniac a les propriétés dynamiques des molécules de forme tétraédrique qui possèdent un axe de symétrie ternaire (figure 1). Elle a un mouvement de vibration auquel correspondent des états d'énergie entre lesquels se produisent des transitions de fréquence située dans le domaine de l'infrarouge. La fonction potentielle de la molécule d'ammoniac est sensiblement de forme parabolique, déformée par un seuil de potentiel (figure 2) : les niveaux d'énergie quantifiée, situés au-dessus du seuil de potentiel, sont par conséquent équidistants, les niveaux correspondant à une énergie inférieure au seuil sont dédoublés. La rotation crée des distorsions dans la fonction potentielle qui rendent compte de la structure fine.

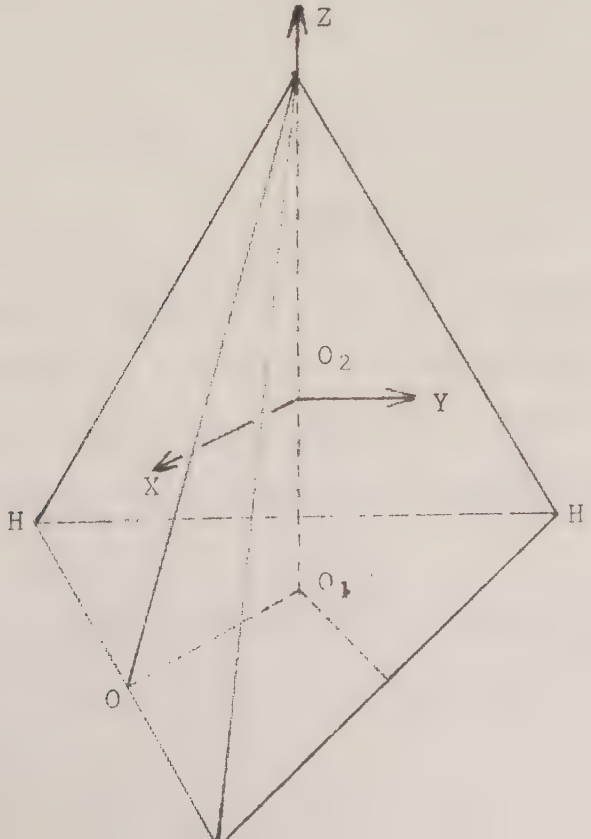


Figure I

I - SPECTRE D'INVERSION :

En première approximation la fonction potentielle ne dépend que de z, distance de l'atome d'azote au plan qui contient les 3 atomes d'hydrogène (figure 1), elle est symétrique par rapport à ce plan, nulle quand z est grand, elle présente un maximum relatif pour z = o, où le potentiel est - 43.068 cm^{-1}, et 2 minima où le potentiel est -45.140 cm^{-1} (figure 2) (B.19).

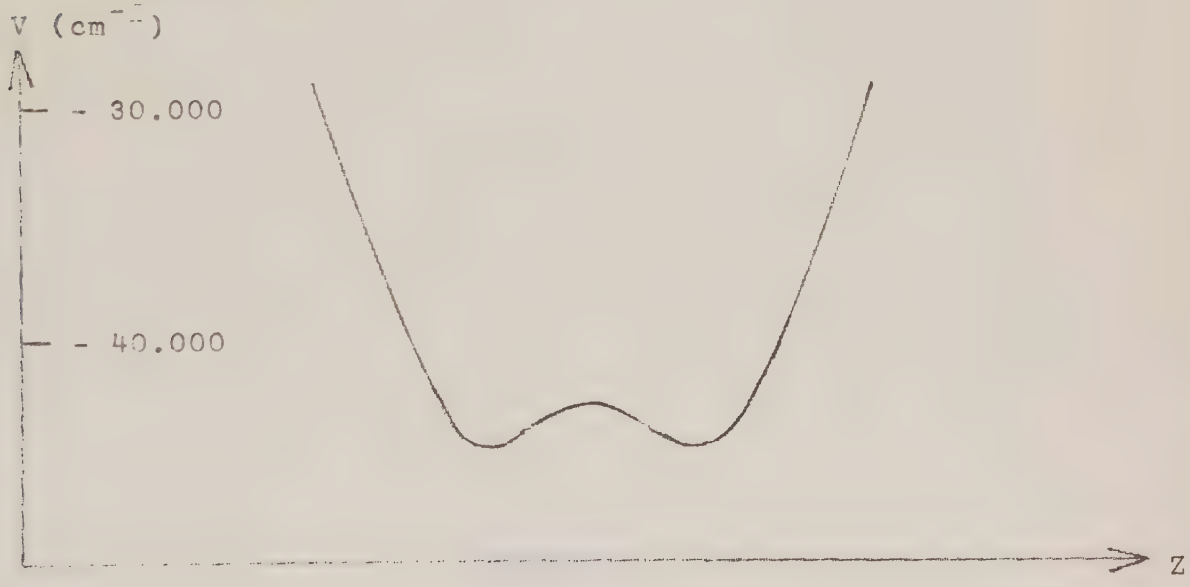


FIGURE 2

L'atome d'azote, d'après la théorie classique, ne peut franchir le seuil de potentiel si son énergie de vibration est inférieure à ce seuil. Cependant la mécanique quantique introduit, dans les mêmes conditions, une probabilité non nulle de franchissement du seuil de potentiel.

Ce phénomène, appelé effet tunnel, permet d'expliquer la formation de doublets entre les niveaux d'énergie de vibration

les plus bas; ces doublets donnent naissance au spectre d'inversion.

La fonction potentielle, représentée sur la figure 3, donne des résultats qui permettent d'interpréter ce spectre (B.21).

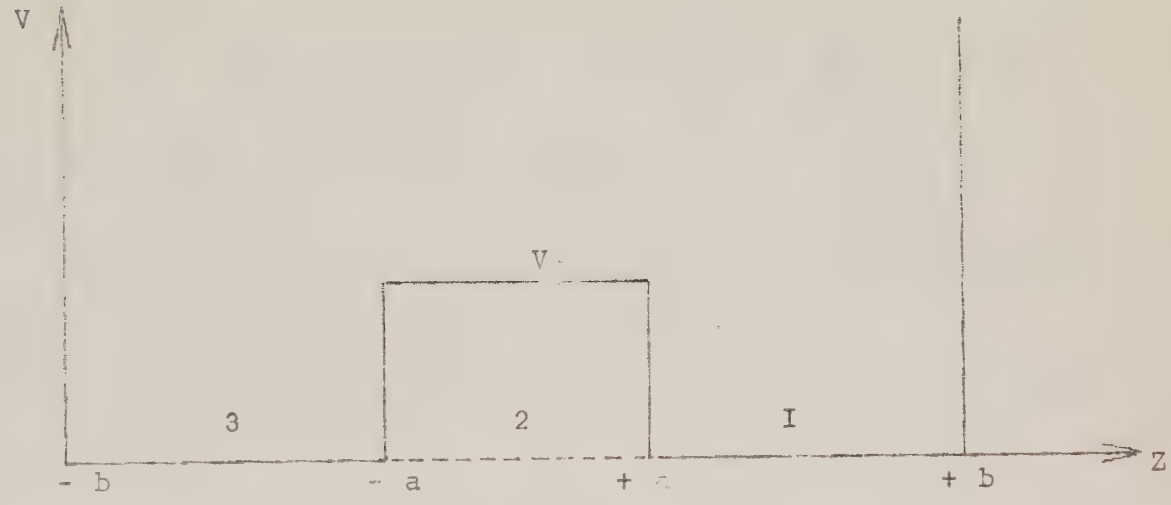


FIGURE 3

La solution de l'équation de SCHRODINGER donne les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde dans chacune des régions 1, 2 ou 3, lorsqu'on relie les solutions respectives par des conditions aux limites. Si on ne considère qu'une seule dimension, l'Hamiltonien du système prend la forme suivante :

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_z \qquad (I - 1)$$

et l'équation :

$$H\psi = W\psi$$

avec $W < V_o$ s'écrit dans les régions 1 et 2 :

$$\psi_1'' + \lambda_1^2 \psi_1 = o \qquad \text{avec } \lambda_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} W \qquad {}^1(I-2)$$

$$\psi_2'' - \lambda_2^2 \psi_2 = o \qquad \text{avec } \lambda_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_o - W)$$

ψ_3 est telle que : $\psi_3 = \psi_1(-z)$

Dans la région 2, la solution pour $z < o$ est obtenue à partir de la solution $\psi_2(z)$ pour $z > o$.

La forme générale de la fonction d'onde dans la région 1 est

$$\psi_1 = A \sin \lambda_1 z + B \cos \lambda_1 z$$

on doit avoir :

$$\psi_1(b) = o \quad \text{d'où} \quad B = -A \operatorname{tg} \lambda_1 b$$

$$\psi_1(z) = A \frac{\sin \lambda_1 (b-z)}{\cos \lambda_1 z} \qquad {}^1(I-3)$$

Dans la région 2, la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_2 = C \operatorname{sh} \lambda_2 z + D \operatorname{ch} \lambda_2 z$$

ψ_2 est soit symétrique, ce qui entraîne : $\psi'_2(o) = o$

soit antisymétrique, ce qui entraîne : $\psi_2(o) = o$

d'où : $\psi_2 = B_s \, Ch \, \lambda_2 \, z$

$\psi_2 = B_A \, sh \, \lambda_2 \, z$ 1(I - 4)

Les conditions aux limites :

$$\psi_1 (a) = \psi_2 (a)$$

$$\psi'_1 (a) = \psi'_2 (a) \qquad 1(I - 5)$$

et les expressions (I - 3), (I - 4) et (I - 5) donnent pour les solutions symétrique et antisymétrique respectivement :

$$A \frac{\sin \lambda_1 (b - a)}{\cos \lambda_1 b} = B_s \, Ch \, \lambda_2 \, a$$

$$- A \, \lambda_1 \frac{\cos \lambda_1 (b - a)}{\cos \lambda_1 b} = B_s \, \lambda_2 \, sh \, \lambda_2 \, a$$

d'où : $\lambda_1^{-1} \, tg \, \lambda_1 (b - a) = - \lambda_2^{-1} \, \coth \lambda_2 a$ 1(I - 6)

et : $$A \frac{\sin \lambda_1 (b - a)}{\cos \lambda_1 b} = B_A \, sh \, \lambda_2 \, a$$

$$- A \, \lambda_1 \frac{\cos \lambda_1 (b - a)}{\cos \lambda_1 b} = B_A \, \lambda_2 \, Ch \, \lambda_2 \, a$$

d'où : $\lambda_1^{-1} \, tg \, \lambda_1 (b - a) = - \lambda_2^{-1} \, th \, \lambda_2 \, a$ 1(I - 7)

Dans ces 2 équations, tous les paramètres autres que W sont définis par les conditions du problème. λ_1 et λ_2 dépendent de W.

Les niveaux d'énergie sont donc déterminés.

Une étude qualitative de ces équations suffit pour mettre en évidence les principales propriétés de l'inversion. Avec

$$b > a$$

$$\text{et } W < V_o$$

La solution symétrique (I - 6) donne :

$$\operatorname{tg} \frac{2m}{\hbar^2} W (b-a) = - \frac{W}{V_o - W} \coth x \qquad 1 (I - 8)$$

si nous posons : $x = \frac{2m}{\hbar^2} (V_o - W) a$

tandis que la solution antisymétrique (I - 7) donne :

$$\operatorname{tg} \frac{2m}{\hbar^2} W(b - a) = - \frac{W}{V_o - W} \operatorname{th} x \qquad 1(I - 9)$$

et puisque $W < V_o$, les seules solutions possibles sont telles que

$$\operatorname{tg} \frac{2m}{\hbar^2} W(b - a) < o \qquad 1 (I - 10)$$

c'est-à-dire :

$$(n - \frac{1}{2}) \Pi < \frac{2m}{\hbar^2} W(b - a) < n \Pi$$

avec $n = 1, 2 \ldots N$ où N est déterminé par la grandeur du paramètre $\frac{2m}{\hbar^2} V_o (b - a)$

Considérons à présent, à partir de (I - 8) et (I - 9),

$$\text{tg } \frac{2m}{\hbar^2} W^S (b - a) = - \frac{W^S}{V_o - W^S} \coth x$$

$$\text{et tg } \frac{2m}{\hbar^2} W^A (b - a) = - \frac{W^A}{V_o - W^A} \text{ th } x \qquad 1(I - 11)$$

Pour tout $x > o$ nous savons que coth x est plus grand que th x. Donc pour un état n donné, où n représente l'ensemble des nombres quantiques définissant un état, nous avons :

$$W_n^A > W_n^S \qquad 1(I - 12)$$

Pour $W < V_o$, il existe une série de doublets, la différence d'énergie entre 2 doublets est plus grande que la différence d'énergie entre les niveaux d'un même doublet ainsi que le montre le diagramme des niveaux d'énergie donné par TOWNES et SCHAWLOW (Microwave Spectroscopy, page 301)

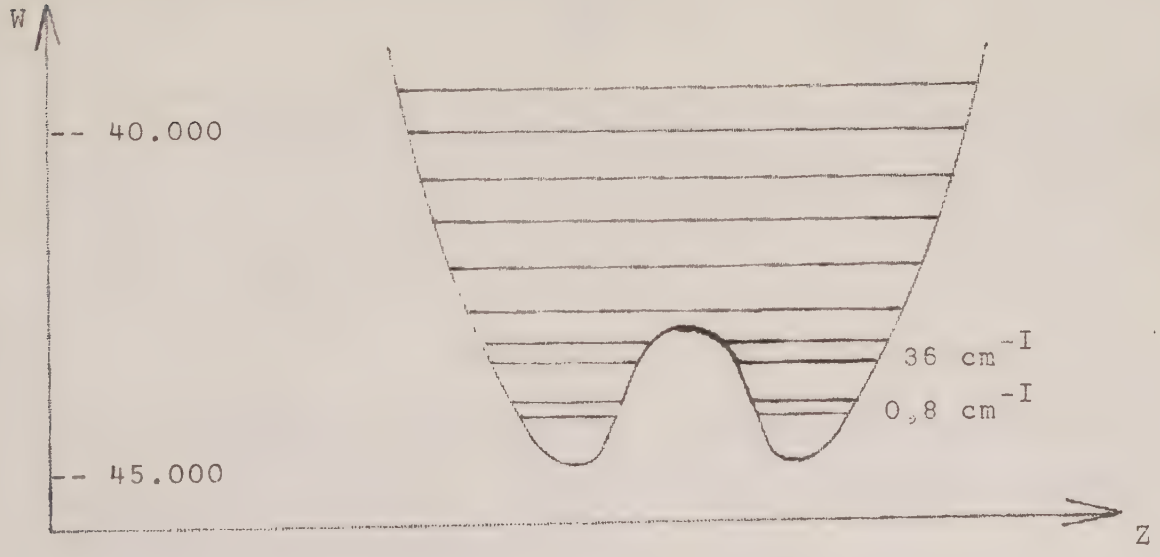


FIGURE 4

Le niveau le plus bas d'un doublet correspond à l'état symétrique, le niveau le plus haut correspondant à l'état antisymétrique. Le doublet auquel nous nous intéresserons par la suite correspond à 0,8 cm^{-1}. L'écart d'énergie $\Delta W_n = W_n^A - W_n^S$ croît quand on monte dans l'échelle des énergies.

Pour l'état caractérisé par n, la fonction d'onde prend la forme :

$$\Psi_n(z,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_n^S(z)\, e^{-i \frac{W_n^S}{\hbar} t} + \psi_n^A(z)\, e^{-i \frac{W_n^A}{\hbar} t} \right]$$

ou

$$\Psi_n(z,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_n^S(z) + \psi_n^A(z)\, e^{-i \frac{\Delta W_n}{\hbar} t} \right] e^{-i \frac{W_n^S}{\hbar} t} \qquad (I - 13)$$

la fréquence de la raie d'inversion est :

$$\nu_n = \frac{\Delta W_n}{h}$$

Les transitions entre niveaux d'inversion sont d'origine dipolaire électrique. Le moment dipolaire restant constamment sur l'axe de symétrie, il est égal à :

$$\mu = q\, z$$

où q représente l'ensemble des charges électroniques de la molécule. Les éléments de matrice du moment dipolaire, entre les états n et m, sont tels que :

$$\langle \psi_n^S \left| \mu_z \right| \psi_m^S \rangle = q \int_{-b}^{+b} \psi_n^S \; z \; \psi_m^S \; dz = o$$

$$\langle \psi_n^A \left| \mu_z \right| \psi_m^A \rangle = q \int_{-b}^{+b} \psi_n^A \; z \; \psi_m^A \; dz = o$$

$$\langle \psi_n^S \left| \mu_z \right| \psi_m^A \rangle = q \int_{-b}^{+b} \psi_n^S z \; \psi_m^A \, dz = q \int_{-b}^{+b} \psi_m^A \; z \; \psi_n^S \; dz \neq o$$

Les transitions ne peuvent se produire qu'entre un état symétrique et un état antisymétrique.

- STRUCTURE FINE :

A une transition entre niveaux d'inversion ne correspond pas en réalité une raie simple, mais une série de raies, dites de structure fine (B-19), qui sont dues à la rotation de la molécule. Le mouvement de rotation donne naissance à un moment cinétique $\vec{J}$ dont la quantification conduit aux niveaux d'énergie de rotation. Les transitions entre niveaux de rotation se situent dans le domaine de l'infrarouge et ne nous intéressent donc pas directement. Cependant leur calcul nous sera utile pour déterminer le moment cinétique $\vec{J}$ et sa projection $\vec{K}$ sur l'axe de symétrie, ainsi que les règles de sélection.

V -Etude de la rotation :

a/ -Quantification :

Les niveaux d'énergie de rotation sont obtenus en cherchant les solutions quantifiées de l'Hamiltonien de rotation de la molécule considérée comme un corps rigide. Ils sont déterminés à partir des moments d'inertie I_x, I_y et I_z calculés autour des axes x, y, z, d'un système de référence dont l'origine est prise au centre de gravité O_2 de la molécule, l'axe z coïncidant avec l'axe de symétrie (figure 1). La molécule étant dite "Toupie Symétrique", nous avons :

$$I_x = I_y = I_B$$

$$I_z = I_C$$

Soit J le moment cinétique, l'énergie de rotation est donnée par :

$$W = \frac{J_x^2}{2 I_x} + \frac{J_y^2}{2 I_y} + \frac{J_z^2}{2 I_z} = \frac{J^2 - J_z^2}{2 I_B} + \frac{J_z^2}{2 I_C}$$

$$W = \frac{J^2}{2 I_B} + J_z^2 \left(\frac{1}{2 I_C} - \frac{1}{2 I_B}\right)$$

Les valeurs propres de l'opérateur J^2 et de l'opérateur J_z, projection de $\vec{J}$ sur l'axe de symétrie, sont :

$$J^2 = J (J + 1) \hbar^2$$

$$J_z = K \hbar \qquad \text{K pouvant varier de } -J \text{ à } +J$$

Si nous posons :

$$B = \frac{h}{8\pi^2 I_B} \qquad C = \frac{h}{8\pi^2 I_C}$$

Nous obtenons les niveaux d'énergie de rotation permis pour ce genre de molécules sous la forme suivante :

$$W = h\{ B\, J(J+1) + (C - B)\, K^2 \} \qquad 1(I-14)$$

b/ Règles de sélection :

Par suite de la symétrie, le moment dipolaire n'a pas de composante normale à l'axe de la molécule, la projection du moment cinétique sur l'axe de symétrie ne peut pas changer sous l'effet du rayonnement.

Donc : $\Delta K = 0$ 1(I-15)

D'autre part, suivant les règles générales de sélection sur le moment cinétique, nous avons :

$$\Delta J = 0, \pm 1 \qquad 1(I-16)$$

La fréquence de la transition est donc :

$$\nu = \frac{W_2 - W_1}{h} = 2\, B\, (J+1) \qquad 1(I-17)$$

La fréquence observée ne dépend pas de I_C. L'observation du spectre de rotation ne permet pas de déterminer les deux paramètres l_{12}, qui représente la distance entre un atome d'hydrogène et l'atome d'azote, et θ qui représente l'angle entre l_{12} et l'axe moléculaire z.

Ces deux paramètres donnent la configuration moléculaire

complète. Cependant l'observation des spectres de 2 espèces isotopiques d'une même molécule, telles que $N^{14}H_3$ et $N^{15}H_3$, permet de mesurer l_{12} et θ :

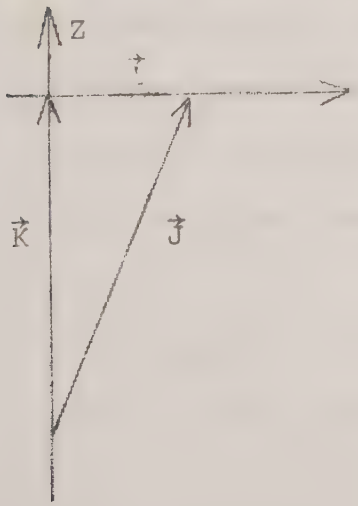
$$l_{12} = 1{,}014 \text{ Å}$$

$$\theta = 106°47'$$

$$B = 298.000 \text{ MHz}$$

-Etude de la structure fine :

Les intervalles entre niveaux d'énergie de rotation (I - 14) sont grands. Ces niveaux n'ont, par eux-mêmes, aucune influence sur le spectre d'inversion. Mais la rotation donne naissance à des forces centrifuges qui, par distorsion de la molécule, modifient son potentiel. Une rotation autour de l'axe de symétrie provoque des forces qui tendent à aplatir la molécule en faisant croître l'angle H-N-H : la fréquence d'inversion augmente. La force centrifuge est proportionnelle au carré de la projection du moment angulaire sur l'axe, soit K^2 (figure 5), la fréquence augmente donc d'une quantité bK^2 où b est une constante positive.



Une rotation autour d'un axe perpendiculaire à l'axe de symétrie donne naissance à des forces qui allongent la molécule, donc diminuent l'angle H-N-H, la fréquence d'inversion décroît d'une quantité :

$$al^2 = a\left[J(J+1) - K^2 \right]$$

où a est également une constante positive

et l est la composante du moment cinétique normale à l'axe de symétrie.

La fréquence est donc de la forme :

$$\nu = \nu_o - a\left[J(J+1) - K^2\right] + bK^2 + f(J+,K)$$

la fonction f contenant les puissances de J et K supérieures à 2.

NEWTON et THOMAS ont fait l'étude du spectre d'inversion et ont calculé a et b en incluant, dans la fonction potentielle, des termes rendant compte des déformations de la molécule dues aux forces centrifuges. Ils ont trouvé: a = 102 MHz et b = 55,5 MHz, alors que les valeurs expérimentales sont: à = 151,5 MHz et b = 59,9 MHz. L'accord est assez bon. HADLEY et DANNISON ont apporté d'autres modifications à la fonction potentielle mais leurs résultats sont en désaccord avec les résultats expérimentaux. On n'a pas trouvé de fonction potentielle qui décrive le comportement du spectre d'inversion et donne des résultats théoriques pour tous les isotopes et tous les états, dont l'accord avec les résultats expérimentaux est supérieur à 10 %. Une seule dimension ne permet pas, semble-t-il, de traiter le problème. Le succès relatif du problème traité à une dimension, provient du fait qu'il n'y a qu'un mode normal de vibration inclus dans l'inversion. Cependant d'autres modes normaux peuvent affecter considérablement l'inversion.

A partir de fréquences mesurées, WILLIAM E. GOOD a exprimé le nombre d'ondes des raies de structure fine sous la forme 1(I - 18) :

$$\left[\frac{f}{nC}\right]_{cm^{-1}} = 0,79347 + 0,005048\ J\ (J+1)$$
$$+ 0,007040\ K^2 + 0,00001546\ J^2(J+1)^2$$
$$- 0,00004260\ J(J+1)\ K^2 + 0,00002920\ K^4 \qquad \text{I(I - 18)}$$
$$\text{(B.7)}$$

et SIMMONS et GORDY ont donné un développement plus complet de ν (B.18) :

$$\nu = 23.787 - 151,3\ J(J+1) + 211\ K^2 + 0,5503\ J^2(J+1)^2$$
$$- 1,531\ J(J+1)K^2 + 1,055\ K^4 \qquad \text{I(I - 19)}$$

Cette expression donne des écarts de 25 à 50 MHz avec les résultats expérimentaux.

La raie J = 3, K = 3, qui fait l'objet de notre étude, correspond à f = 23.870.129 KHz. I(I - 20)

Dès 1946, WILLIAM E. GOOD avait fait remarquer que cette raie possédait une structure hyperfine. En 1955, au moyen d'un spectromètre à haute résolution, GORDON a mis en évidence cette structure hyperfine : la raie 3-3 est formée d'une raie centrale, asymétrique, qui contient 3 composantes. Nous nous limiterons, à présent, à l'étude de la raie centrale.

CHAPITRE II

STRUCTURE HYPERFINE

L'examen des raies de structure fine montre que celles-ci se présentent en réalité comme un spectre de raies dites de structure hyperfine Dans le cas de la molécule d'ammoniac $N^{14}H_3$, cette structure hyperfine est due essentiellement à l'interaction du moment quadrupolaire du noyau d'azote avec le **gradient** de champ électrique créé par les charges extérieures à ce noyau.

Un noyau dont le nombre de masses est impair obéit à la statistique de FERMI-DIRAC; son spin nucléaire est demi-entier. Un noyau dont le nombre de masses est pair obéit à la statistique de BOSE-EINSTEIN; son spin nucléaire est entier.

Beaucoup de noyaux, dont le spin I est égal ou supérieur à 1, possèdent un moment quadrupolaire électrique, c'est le cas de l'atome d'azote N^{14}, pour lequel I = 1. Par contre, l'atome N^{15}, pour lequel $I = \frac{1}{2}$, n'a pas de moment quadrupolaire (B. 15).

Ce moment interagit avec le gradient de champ électrique produit par toutes les charges autres que celles que possède le noyau. Nous effectuons le calcul de l'interaction quadrupolaire en deux étapes. Nous partons de l'interaction électrostatique entre une charge nucléaire et une charge située en dehors du noyau, ce qui nous permet d'établir une expression qui contient le terme

d'interaction quadrupolaire, que nous mettons sous forme tensorielle symétrique. Dans ce terme, établi en toute généralité, pour toutes les molécules dont un noyau possède un moment quadrupolaire électrique, figure un facteur q_j qui représente le gradient du champ électrique, ce facteur doit être déterminé dans chaque cas particulier. Pour l'Ammoniac nous le déterminons en faisant intervenir les fonctions d'onde de cette molécule.

- INTERACTIONS ELECTROSTATIQUES

L'énergie d'interaction entre une charge nucléaire de densité $\rho_n(r_n)$, dans un volume dV_n, à la distance r_n du centre C du noyau, et une charge extérieure à ce noyau de densité $\rho_e(r_e)$, dans un volume dV_e à la distance r_e du centre du noyau (figure 6) ($r_e >> r_n$)

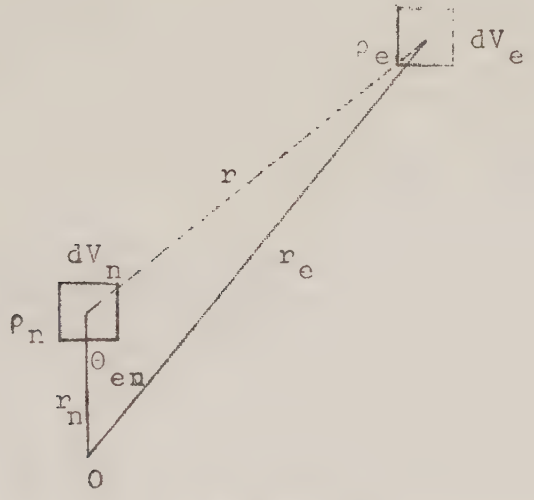


FIGURE 6

s'écrit (B.13-14)

$$H_{el} = \int_{V_e} \int_{V_n} \frac{\rho_e(r_e)\,\rho_n(r_n)}{r}\, dV_e\, dV_n \qquad (I - 1)$$

où r est le rayon vecteur joignant dV_e à dV_n. L'angle entre les droites joignant 0 à dV_n et dV_e est représenté par θ_{en}

La fonction 1/r se développe en polynômes de Legendre. Nous écrivons :

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{r_e^2 + r_n^2 - 2\, r_e\, r_n \cos\ \theta_{en}}}$$

$$= \frac{1}{r_e} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{r_n^2}{r_e^2} - 2\,\frac{r_n}{r_e} \cos\ \theta_{en}}}$$

et nous posons : $t = r_n/r_e$ $\qquad$ $x = \cos\ \theta_{en}$

1/r devient :

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{r_e} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\,t\,x + t^2}}$$

$$= \frac{1}{r_e} \left[1 + \frac{1}{2}\,(2t\,x - t^2) - \frac{3}{8}\,(2t\,x - t^2) + \cdots \right]$$

Nous écrivons 1/r sous forme d'une série de polynômes de Legendre:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{r_e} + \frac{r_n}{r_e^2}\ P_1 + \frac{r_n^2}{r_e^3}\ P_2 + \cdots$$

avec $P_1 = \cos\ \theta_{en}$

$$P_2 = \frac{1}{2}\,(3 \cos^2\ \theta_{en} - 1) \qquad 2(I - 2)$$

P_1 correspond au moment multipolaire d'ordre 2^1. Si 1 = 2, nous avons le moment quadrupolaire électrique.

Si nous nous limitons à 1 = 2, l'énergie d'interaction électrostatique prend alors la forme suivante :

$$H_{el} = H_1 + H_d + H_q \qquad 2(I - 3)$$

où $$H_1 = \int_{V_e} \int_{V_n} \frac{\rho_e(r_e)\ \rho_n(r_n)}{r_e}\ dV_e\ dV_n$$

$$H_d = \int_{V_e} \int_{V_n} \frac{\rho_e(r_e)\ \rho_n(r_n)\ P_1\ r_n}{r_e^2}\ dV_e\ dV_n$$

et $$H_q = \int_{V_e} \int_{V_n} \frac{\rho_e(r_e)\ \rho_n(r_n)\ P_2\ r_n^2}{r_e^3}\ dV_e\ dV_n \qquad 2(I - 4)$$

L'énergie d'un système dans un champ électrique extérieur se représente comme une somme d'énergies. Le premier terme H_1 correspond à une énergie monopolaire :

$$H_1 = Z_e\ \Phi_e$$

où $$Z_e = \int_{V_n} \rho_n\ dV_n$$

$$\Phi_e = \int_{V_e} \frac{\rho_e}{r_e}\ dV_e$$

le deuxième terme H_d correspond à une énergie dipolaire (ce terme est nul en général, en effet si un noyau possède un moment dipolaire, celui-ci a une certaine direction par rapport au moment angulaire, il doit donc y avoir au moins un état nucléaire dégénéré ou de même énergie pour une direction opposée du moment dipolaire. En général, on ne trouve pas cet état). Le troisième H_q correspond à l'énergie due au moment quadrupolaire. Les moments d'ordres plus élevés sont trop petits pour pouvoir être mesurés. Nous étudions le terme d'interaction quadrupolaire.

II - CALCUL DE L'HAMILTONIEN D'INTERACTION QUADRUPOLAIRE :

Nous avons trouvé :

$$H_q = \int_{V_e} \int_{V_n} \rho_n(r_n)\, r_n^2\, \tfrac{1}{2}\,(3\cos^2\theta_{en} - I)\, \frac{\rho_e(r_e)}{r_e^3}\, dV_e\, dV_n$$

que nous écrivons :

$$H_q = \int_{V_e} \int_{V_n} \rho_n(r_n)\, \tfrac{1}{2}\,(3\, r_n^2\, r_e^2 \cos^2\theta_{en} - r_n^2\, r_e^2)\, \frac{\rho_e(r_e)}{r_e^5}\, dV_n\, dV_e \qquad 2(I-5)$$

de manière à mettre en évidence le produit scalaire des 2 vecteurs $\vec{r}_e$ et $\vec{r}_n$:

$$\vec{r}_n \cdot \vec{r}_e = r_n\, r_e \cos\theta_{en} = x_{ni}\, x_{ei} + x_{nj}\, x_{ej} + x_{nk}\, x_{ek}$$

les indices i, j, k, représentent les 3 vecteurs unitaires sur les axes x, y, z, respectivement.

En posant :

$$Q_{ij} = \int_{V_n} \rho_n(r_n) \left[3\, x_{ni}\, x_{nj} - r_n^2 \quad \delta_{ij} \right] dV_n \qquad {}^2(\text{II-6})$$

ou $$Q_{ij} = \sum e \left[3\, x_{ni}\, x_{nj} - r_n^2 \quad \delta_{ij} \right]$$

la sommation portant sur toutes les charges du noyau,

$$\text{et} \quad \nabla E_{ij} = - \int_{V_e} \frac{\rho_e(r_e)}{r_e^5} \left[3\, x_{ei}\, x_{ej} - r_e^2 \quad \delta_{ij} \right] dV_e \qquad {}^2(\text{II-7})$$

l'Hamiltonien d'interaction prend la forme :

$$H_q = - \frac{1}{6} \; Q_{ij} \cdot \nabla E_{ij} \qquad {}^2(\text{II-8})$$

Nous appelons Q_{ij} tenseur moment quadrupolaire et ∇E_{ij} tenseur gradient de champ électrique. Ces deux tenseurs sont des tenseurs symétriques si nous écrivons :

$$Q_{ij} = \int_{V_n} \rho_n(r_n) \left[3 \, \frac{x_{ni}\, x_{nj} + x_{nj}\, x_{ni}}{2} - r_n^2 \quad \delta_{ij} \right] dV_n \qquad {}^2(\text{II-9})$$

$$\nabla E_{ij} = - \int_{V_n} \frac{\rho_e(r_e)}{r_e^5} \left[3 \quad \frac{x_{ei}\, x_{ej} + x_{ej}\, x_{ei}}{2} - r_e^2 \quad \delta_{ij} \right] dV_e \qquad {}^2(\text{II-10})$$

La trace de ces tenseurs est nulle. A ces tenseurs correspondent des opérateurs dont il faut prendre la moyenne sur les états non perturbés pour obtenir les écarts d'énergie. Ceux-ci sont supposés

petits par rapport aux intervalles de structure fine, si bien que nous prenons comme états non perturbés les états correspondant aux différentes valeurs du moment angulaire.

Nous passons des opérateurs positions aux opérateurs moments et nous écrivons l'opérateur moment quadrupolaire sous la forme :

$$Q_{ij} = C \left[3 \frac{(I)_i (I)_j + (I)_j (I)_i}{2} - I^2 \delta_{ij} \right] \quad 2(I-11)$$

où C est une constante de proportionnalité, qu'il reste à déterminer en fonction d'une quantité scalaire Q (constante quadrupolaire nucléaire) et du moment de spin I. La constante quadrupolaire est calculée dans l'état $M_I = I$ et elle est définie à partir de 2(II - 6) par :

$$eQ = \int \rho_n \, m_I = I \; (3 z_n^2 - r_n^2) \, dV_n = (II \mid Q_{33} \mid II)$$

$$= C \, (II \mid 3 I_z^2 - I^2 \mid II) = C \, (3 I^2 - I^2) = C \, I(2I - 1)$$

$$C = \frac{eQ}{I \, (2 I - 1)}$$

d'où :

$$Q_{ij} = \frac{eQ}{I \, (2 I - 1)} \left[3 \frac{(I)_i (I)_j + (I)_j (I)_i}{2} - I^2 \delta_{ij} \right] \quad 2(I-I2$$

De la même manière, nous avons pour les éléments diagonaux en J :

$$\nabla E_{ij} = - \frac{eq_J}{J(2J-1)} \left[3 \frac{(J)_i(J)_j + (J)_j(J)_i}{2} - J^2 \delta_{ij} \right] \quad (I-13)$$

où q_J, multiplié par e, représente le gradient du champ électrique

$$q_J = \frac{1}{e} \int_{V_e} \frac{3 z_e^2 - r_e^2}{r_e^5} \rho_e(r_e) \, dV_e \qquad m_J = J \quad (I-14)$$

nous évaluerons cette expression ultérieurement :

L'Hamiltonien (I - 8) devient :

$$H_q = \frac{1}{6} \frac{e^2 q_J Q}{I(2I-1) J(2J-1)} \times$$

$$\sum_{ij} \left[3 \frac{(I)_i(I)_J + (I)_J(I)_i}{2} - \delta_{ij} I^2 \right] \left[3 \frac{(J)_i(J)_j + (J)_j(J)_i}{2} - \delta_{ij} J^2 \right] \quad (I-15)$$

Comme I et J commutent entre eux, nous avons :

$$\sum_{ij} (I)_i(I)_j \, (J)_i(J)_j = \sum_{ij} (I)_i(J)_i(I)_J(J)_j = (I \cdot J)^2$$

$$\sum_{ij} (I)_i(I)_j \, \delta_{ij} J^2 = I^2 . J^2$$

$$\sum_{ij} \delta_{ij} I^2 . J^2 = 3 I^2 . J^2$$

et avec :

$$(I)_i(I)_j = (I)_j(I)_i + (I)_{i \wedge j} = (I)_j(I)_i + i(I)_k$$

Nous pouvons donner l'expression de l'hamiltonien d'interaction, dans le cas le plus général (B.16)

$$H_q = \frac{1}{2} \frac{e^2 q_J Q}{I(2I-1)\ J(2J-1)} \left[3\ (I.J)^2 + \frac{3}{2} I.J. - I^2 J^2 \right] \quad {}^2(I - 16)$$

Dans cette formule, seul q_J n'est pas encore déterminé, nous allons le faire dans le cas particulier de la molécule d'Ammoniac.

I - CALCUL DE L'HAMILTONIEN D'INTERACTION QUADRUPOLAIRE APPLIQUE AU CAS DE L'AMMONIAC :

Nous avons ${}^2(II-14)$

$$q_J = \frac{1}{e} \int_{V_e} \frac{3\ z_e^2 - r_e^2}{r_e^5} \rho_e(r_e)\ dV_e$$

$m_J = J$

$$= \frac{1}{e} \int_{V_e} \frac{3 \cos^2 \theta_{e.} - 1}{r_e^3} \rho_e(r_e)\ dV_e \qquad {}^2(I - 17)$$

$m_J = J$

Cette expression représente le gradient de champ électrique de la molécule et n'est pas une constante moléculaire, sa valeur dépend de l'état de rotation de la molécule. Nous introduisons la constante caractéristique q, qui, multipliée par e, représente le gradient de champ électrique dans la direction de l'axe moléculaire. Nous déterminons q_J en fonction de q, en faisant intervenir les fonctions d'onde normalisées pour les états de rotation de la molécule $N^{14}H_3$ (B.10).

Le terme $(3 \cos^2 \theta_{e.} - 1)$ de l'équation précédente se calcule

à l'aide du théorème d'addition des harmoniques sphériques.

Soient : θ_{en}, ϕ_{en} les coordonnées sphériques d'un point de la molécule, dans un système d'axes dont l'axe z est pris dans la direction du moment cinétique $\vec{J}$,

θ_1, ϕ_1 sont les coordonnées du même point dans un système d'axes où l'axe z_o est pris suivant l'axe moléculaire.

θ_2, ϕ_2 donnent les angles de l'axe de la molécule avec le moment cinétique $\vec{J}$.

Le théorème donne :

$$3\cos^2\theta_{en} = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta_2 - 1)(3\cos^2\theta_1 - 1)$$

+ termes dépendant de $e^{i\phi_2}$

La relation entre q_J et q est alors, à partir de 2(I -17)

$$q_J = q \left\langle \frac{3}{2}\cos^2\theta_2 - \frac{1}{2} \right\rangle_{m_J = J} \qquad 2(I - 18)$$

avec :

$$q = \frac{1}{e}\int_{V_e} \frac{3\cos^2\theta_1 - 1}{r_e^3}\,\rho_e(r_e)\,dV_e$$

qui est une constante moléculaire.

Les fonctions d'onde de la molécule d'Ammoniac sont en remplaçant θ_2 par θ :

$U_J K_m = \frac{1}{2\pi}\Theta(\theta)$ à un facteur de phase près

où $\Theta(\theta) = c\,(1 + \cos\theta)^{\frac{1}{2}(J+K)}\,(1 - \cos\theta)^{\frac{1}{2}(J-K)}$

avec $C^2 = \dfrac{(2J+1)\,!}{2^{2J}\,(J+K)\,!\,(J-K)\,!}$

La moyenne de q_J est obtenue en calculant l'intégrale

$$\frac{1}{2}\,\langle 3\cos^2\theta - 1\rangle_{J,m_J=J} = \frac{1}{2}\,C^2 \int_0^{\Pi} (1+\cos\theta)^{J+K}\,(1-\cos\theta)^{J-K}\,(3\cos^2\theta - 1)\sin\theta\,d\theta$$

nous posons : $x = \frac{1}{2}(1+\cos\theta)$ $\qquad dx = -\frac{1}{2}\sin\theta\,d\theta$

d'où :

$$\frac{1}{2}\,\langle 3\cos^2\theta - 1\rangle_{m_J=J} = \frac{1}{2}\,C^2\,2^{J+K}\,2^{J-K}\int_0^1 x^{J+K}\,(1-x)^{J-K}\,(6x^2 - 6x + 1)\,dx$$

$$= 2^{a+b}\,C^2\left[6\int_0^1 x^{a+2}(1-x)^b dx - 6\int_0^1 x^{a+1}(1-x)^b dx + \int_0^1 x^a(1-x)^b\,dx\right]$$

avec : $a = J + K$

$b = J - K$

ou $\int_0^1 x^p (1-x)^q \, dx = \frac{p \,!\, q \,!}{(p+q+1) \,!}$

d'où : $\frac{1}{2}\left(3\cos^2\theta - 1\right)_{m_J = J} =$

$$2^{a+b}\, c^2 \left[6 \frac{(a+2)!\, b!}{(a+b+3)\,!} - 6 \frac{(a+1)!\, b!}{(a+b+2)\,!} + \frac{a\,!\, b\,!}{(a+b+1)!} \right]$$

$$= 2^{a+b}\, c^2 \, \frac{a\,!\, b\,!}{(a+b+3)\,!} \left[(a+b)^2 - (a + 6\,ab + b) \right]$$

$$= 2^{2J}\, c^2 \, \frac{(J+K)!\,(J-K)!}{(2J+3)\,!} \left[6\,K^2 - 2J(J+1) \right]$$

$$= \frac{J}{2J+3} \left[\frac{3\,K^2}{J\,(J+1)} - 1 \right] \qquad \text{(I - 19)}$$

avec (I -16), (I -18) et (I -19)

nous sommes arrivés à la forme définitive de l'Hamiltonien d'interaction :

$$H_q = - \frac{e\,q\,Q}{2I(2I-1)(2J-1)(2J+3)} \left[1 - \frac{3\,K^2}{J(J+1)} \right] \left[3(I.J)^2 + \frac{3}{2}\, I.J - I^2 J^2 \right] \qquad \text{(I - 20)}$$

IV - APPLICATION A LA RAIE D'INVERSION J = 3, K = 3 :

Puisque les vecteurs $\vec{I}$ et $\vec{J}$ sont couplés en champ faible et que le vecteur résultant est $\vec{F_1}$ tel que :

$\vec{F_1} = \vec{I} + \vec{J}$ $\qquad (J - I < F_1 < J + I;\ F_1$ entier)

nous écrivons (B-5, B-13)

$$H_q = - eqQ\left[1 - \frac{3K^2}{J(J+1)}\right]\left[\frac{\frac{3}{4}c\,(c+1) - I\,(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)\,(2J-1)\,(2J+3)}\right] \qquad 2(I - 21)$$

en posant :

$$c = F_1(F_1 + 1) - I(I + 1) - J(J+1)$$

La valeur de la constante de couplage quadrupolaire eqQ est - 4,084 MHz. Les valeurs du facteur

$$f(I,J) = \frac{\frac{3}{4}c\,(c+1) - I\,(I+1)\,J(J+1)}{2I\,(2I-1)\,(2J-1)\,(2J+3)}$$

pour I = 1, J = 3, $\vec{F}_1 = \vec{J} + \vec{I}$

sont les suivantes (B,18)

$F_1 = 4$ f = 0,08333

$F_1 = 3$ f = -0,25

$F_1 = 2$ f = 0,20

D'autre part : $1 - \frac{3K^2}{J(J+1)} = - 1,25$

Les corrections d'énergie à donner aux niveaux d'inversion sont les suivantes, en MHz :

$F_1 = 3$ $W_q = 1,27$ MHz

$F_1 = 4$ $W_q = - 0,425$ MHz

$F_1 = 2$ $W_q = - 1,021$ MHz

Nous obtenons le diagramme suivant :

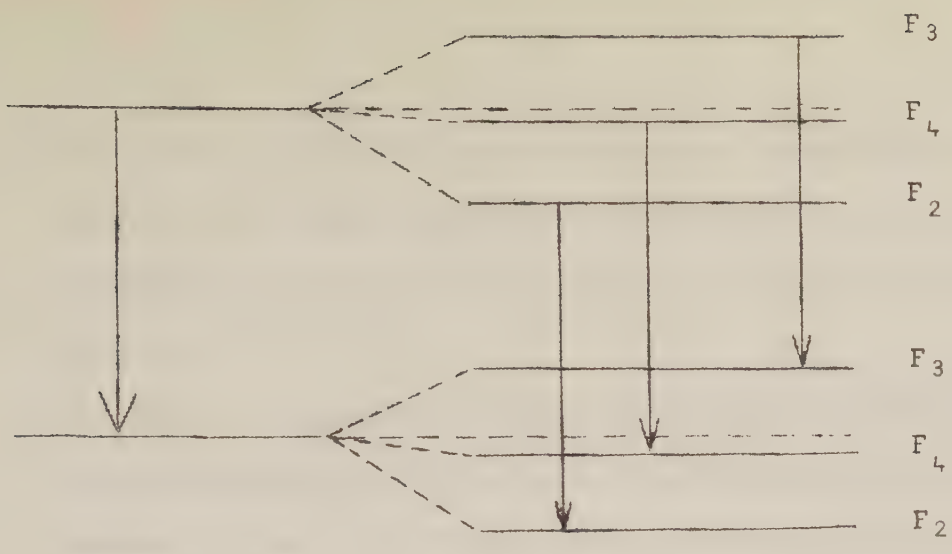


FIGURE 7

Dans ces conditions, les 3 transitions $\Delta F_1 = 0$ donneraient les mêmes fréquences ν_o et les 3 composantes seraient toujours confondues. Mais GORDON a montré et expliqué (B.8) que le passage du niveau supérieur au niveau inférieur est accompagné d'une variation de la constante de couplage quadrupolaire qui est $\Delta(eqQ) \sim 4$ KHz. Une nouvelle correction d'énergie doit être faite, différente pour chacun des sous-niveaux quadrupolaires puisqu'elle dépend de F_1.

Les 3 fréquences de transition correspondant à :

$$\Delta F_1 = 0$$

sont alors :

$$\nu = \nu_o - \Delta(eqQ) \left[1 - \frac{3K^2}{J(J+1)} \right] \frac{\frac{3}{4} c(c+1) - I(I+1)\, J(J+1)}{2I\,(2I-1)\,(2J-1)(2J+3)}$$

c'est-à-dire :

pour $F_1 = 3$ $\quad \nu = \nu_o - 1{,}25$ KHz

$F_1 = 4$ $\quad \nu = \nu_o + 0{,}42$ KHz

$F_1 = 2$ $\quad \nu = \nu_o + 1$ KHz

où ν_o est la fréquence de la raie de structure fine (I-19) ou encore de la raie centrale de structure hyperfine sans tenir compte de la variation de la constante de couplage quadrupolaire (Fig.7).

Ces 3 composantes sont faiblement séparées et en l'absence d'une très haute résolution, elles forment une raie unique de fréquence située au barycentre des 3 composantes non résolues :

$$\nu_m = \frac{\nu_1 I_1 + \nu_2 I_2 + \nu_3 I_3}{I_1 + I_2 + I_3}$$

où I_1, I_2 et I_3 représentent les intensités relatives de ces 3 composantes

I - INTENSITES RELATIVES DES 3 COMPOSANTES QUADRUPOLAIRES :

Les transitions dont nous venons de parler se produisent dans un maser si l'inversion de population a été effectuée auparavant dans un focaliseur électrostatique. En l'absence de focalisation, les intensités relatives sont proportionnelles à $2F_1 + 1$, c'est-à-dire aux facteurs 9, 7 et 5 pour $F_1 = 4,3$ et 2 respectivement. Dans un jet qui traverse le focaliseur, où règne un champ électrique inhomogène ($160\ ^{V}/_{cm} < E < 600\ ^{V}/_{cm}$), les niveaux d'énergie sont affectés par un champ plus ou moins fort. Les vecteurs $\vec{I}$ et $\vec{J}$, ne sont plus couplés pour donner le vecteur résultant

$$\vec{F}_1 = \vec{I} + \vec{J}$$

mais sont découplés et quantifiés séparément.

F_1 n'est plus un bon nombre quantique, par contre

$$M = M_I + M_J$$

l'est, M_I et M_J étant les projections de $\vec{I}$ et $\vec{J}$ sur la direction du champ.

Dans un maser, les intensités relatives sont différentes des intensités à l'équilibre thermique, puisque le nombre de molécules dans un état F_1 est déterminé par la force de focalisation qui est, en première approximation, proportionnelle à M_J^2 (B.8 et B.17). Ceci n'est pas rigoureusement exact. En effet, si on se limite à l'examen de la structure fine, la différence entre le nombre de molécules dans les états supérieur et inférieur est (B.9)

$$n = \frac{N_1}{2} \alpha \Pi^{1/2} A_i \cdot \frac{a^2}{l^2} \chi(x) \qquad 2(I - 24)$$

où N_1 est le nombre de molécules qui arrivent, avec les nombres quantiques $J = K = 3$, dans le focaliseur.

A_i est la section droite efficace de la source

a est la distance de l'axe à la surface de l'électrode

l est la longueur du focaliseur

$$x = \frac{1}{a} \frac{v_c}{\alpha}$$

$$v_c = \left(\frac{2}{m h \nu_o}\right)^{1/2} \frac{M_J K}{J(J+1)} \mu E_m$$

E_m est le maximum du champ électrique dans le focaliseur.

$$\chi(M_J) = x^2 e^{-x^2} - 1$$

L'expression 2(II-24) donnant n doit être modifiée en présence

d'une structure hyperfine :

$$n(F_1,M_J) = N\, g(J,K,F_1)\cdot \lambda(F_1,M_J)\cdot\frac{1}{2}\alpha\sqrt{\pi}\frac{a^2}{f^2}\cdot \chi(M_J) \qquad 2(I\text{-}25)$$

où N est le nombre de molécules à la sortie de la source

$g(J,K,F_1)$ est la fraction de molécules dans l'état quadrupolaire caractérisé par les nombres quantiques : J, K, F_1.

Si nous supposons que la focalisation est adiabatique, c'est à dire que le passage du champ faible au champ fort se fait très lentement, nous avons: $g(J,K,F_1) = g_o(2F_1 + 1)$ où g_o est une constante.

La fonction (F_1,M_J) représente la fraction de ces molécules qui passent de manière adiabatique, d'un état de champ faible à un état de champ fort caractérisé par le nombre quantique M_J. JAUCH, à partir de la théorie de l'effet Stark en champ faible et en champ fort, a établi le diagramme de coordination des niveaux d'énergie pour ce passage (tableau I). (B. IO)

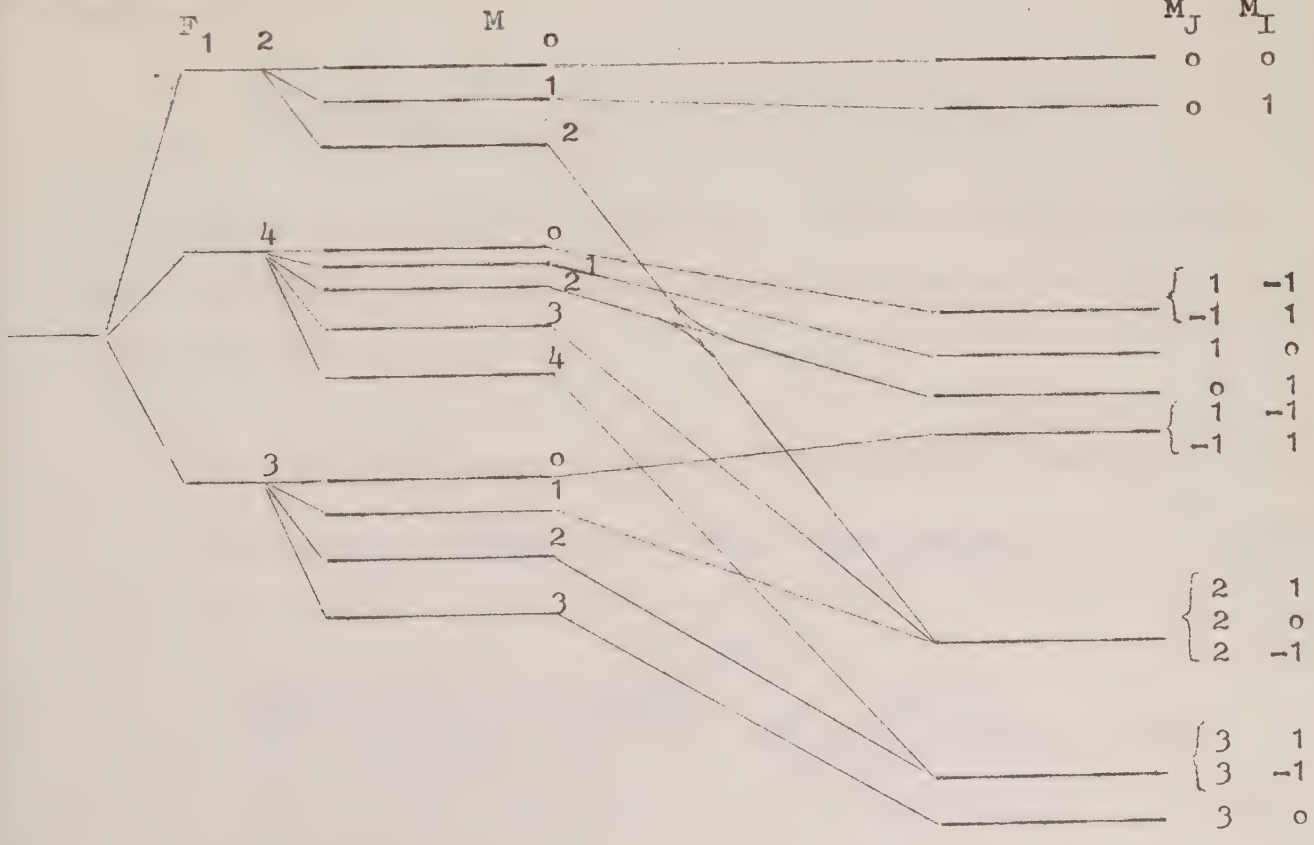


TABLEAU I

Les valeurs du facteur $(2\ F_1 + 1)\ \lambda(F_1, M_J)$ de l'équation (I -25) avec (I -26) sont données dans le tableau 2, déduit de ce diagramme :

F_1	$\|M_J\| = 3$	$\|M_J\| = 2$	$\|M_J\| = 1$
3	4	2	1
4	2	4	3
2	0	0	2

TABLEAU 2

D'autre part, la probabilité de transition est proportionnelle à :

$$\frac{\left[F_1\ (F_1 + 1) + J\ (J + 1) - I\ (I + 1)\right]^2}{F_1\ (F_1 + 1)} \qquad (I - 27)$$

Cette expression est donnée par l'élément de matrice du moment dipolaire électrique, pour la règle de sélection $\Delta F_1 = o$ (B.5), et ses valeurs sont :

$\frac{121}{3}$, 45, $\frac{128}{3}$ pour $F_1 = 3$, 4 et 2 respectivement.

L'intensité respective des trois composantes est donc proportionnelle à :

$$I(F_1) = \frac{\left[F_1(F_1+1)+J(J+1)-I(I+1)\right]^2}{F_1\ (F_1 + 1)}\ (2F_1+1) \sum_{M_J = 1}^{3} \lambda\ (F_1, M_J)\ \chi(M_J) \qquad (I-28)$$

et les intensités relatives sont :

$$1 - 0{,}9174 - 0{,}047 \qquad {}_2(I - 29)$$

pour $F_1 = 3$, 4 , 2 respectivement.

La structure de la raie 3-3 est résumée dans le tableau suivant (tableau 3) :

F_1	3	4	2
Intentié relative ${}_2(I - 29)$	1	0,9174	0,047
Fréquence en KHz ${}_2(I - 23)$	- 1,25	+ 0,42	+ 1

Nous venons d'examiner les trois composantes qui forment la raie centrale J = J,K = 3, issues de transitions correspondant à la règle de sélection $\Delta F_1 = o$. D'autres transitions correspondant à $\Delta F_1 = \pm 1$ donnent naissance à des satellites quadrupolaires. D'autre part, des couplages dus aux spins des noyaux d'hydrogène produisent des interactions magnétiques donnant lieu à une démultiplication des satellites. Pour la raie centrale, ils introduisent des transitions dont les fréquences sont confondues, de ce fait nous les négligeons. Les résultats expérimentaux concernant les satellites quadrupolaires et magnétiques ont été donnés par différents auteurs (B.20), GORDON en particulier (B.8).

Ce dernier a utilisé un spectromètre à une cavité dont le pouvoir de résolution ne permettait pas de mettre en évidence les trois composantes de la raie centrale. Le travail suivant consistera dans l'étude théorique d'un système permettant la résolution de ces trois composantes.

II^{ème} PARTIE

ETUDE THEORIQUE D'UN SPECTROMETRE PERMETTANT DE RESOUDRE LES TROIS COMPOSANTES DE LA RAIE CENTRALE

Un maser à une cavité de longueur l (l~10 cm) permet de résoudre une partie de la structure hyperfine de la raie 3-3, et en particulier de séparer les différents satellites. Mais le pouvoir de résolution est trop faible pour pouvoir séparer les composantes hyperfines qui forment la raie centrale. RAMSEY a montré que le temps d'interaction pouvait être augmenté considérablement en utilisant non pas une seule cavité de longueur plus grande, mais deux cavités de même longueur l, ayant entre elles une distance L. (figure 8).

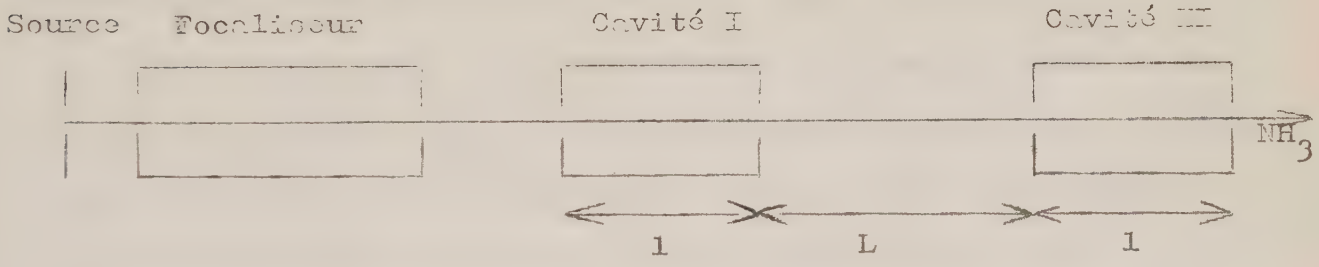


FIGURE 8

Ce système que nous appelons système RAMSEY, en diminuant la largeur de raie, permet de résoudre les trois composantes centrales. A partir du calcul de la probabilité de transition, l'influence respective de la distance L et de l'amplitude du champ électrique dans chacune des cavités sera évaluée dans différents cas. Dans un premier calcul nous supposons que les champs électriques qui règnent dans les cavités I et II ont même amplitude et sont en

phase. Un deuxième calcul nous permettra d'examiner la distorsion des courbes de résonance d'une part lorsque les champs ont même amplitude mais ne sont plus en phase, d'autre part, lorsqu'ils sont en phase mais n'ont plus même amplitude.

I - LES CHAMPS ELECTRIQUES ONT MEME AMPLITUDE ET SONT EN PHASE :

A) -Calcul de la probabilité de transition :

Nous calculons la probabilité de transition dans une cavité unique. A partir de cette probabilité nous verrons ce qui se passe dans la région qui sépare les deux cavités et nous en déduirons la probabilité de transition à la fin du temps d'interaction total.

Soit $E = E_o \cos \omega t$ la composante, le long de l'axe de la cavité sur le monde TM_{010}, du champ électrique qui induit la transition entre les états d'inversion p et q définis précédemment, que nous supposons donnés par l'Hamiltonien non perturbé H_o. La transition est d'origine dipolaire électrique, l'hamiltonien de la perturbation s'écrit :

$$V = - \mu E_o \cos \omega t = - \frac{\mu E_o}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)$$

l'Hamiltonien total est :

$$H = H_o + V = H_o - \mu E_o \cos \omega t \qquad (II - 1)$$

La fonction d'onde se met sous la forme :

$$\Psi = \psi_p \, C_p(t) + \psi_q \, C_q(t) \qquad (II-2)$$

où ψ_p et ψ_q ne dépendent que des coordonnées d'espace.

L'évolution du système est décrite par l'équation de SCHRÖDINGER dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi = H_o \Psi + V\Psi$$

$$i\hbar \left[\dot{C}_p(t)\ \psi_p + \dot{C}_q(t)\ \psi_q \right] =$$

$$H_o \left[C_p(t)\ \psi_p + C_q(t)\ \psi_q \right] + V \left[C_p(t)\ \psi_p + C_q(t)\ \psi_q \right]$$

(II-3)

Multiplions cette équation par ψ_p^* et intégrons sur les coordonnées spatiales, ensuite nous ferons de même pour ψ_q. Avec :

$$H_o\ \psi_p = E_p\ \psi_p$$

$$H_o\ \psi_q = E_q\ \psi_q$$

nous trouvons :

$$i\hbar\ \dot{C}_p(t) = E_p C_p(t) - \frac{1}{2}\ \mu_{pq}\ E_o\ e^{i\omega t}\ C_q(t)$$

$$i\hbar\ \dot{C}_q(t) = E_q C_q(t) - \frac{1}{2}\ \mu_{qp}\ E_o\ e^{-i\omega t}\ C_p(t) \qquad (II-4)$$

Nous n'avons gardé que les termes qui donnent des solutions de résonance. Les équations sans second membre :

$$\dot{C}_p(t) = \frac{E_p}{i\hbar}\ C_p(t)$$

$$\dot{C}_q(t) = \frac{E_q}{i\hbar}\ C_q(t)$$

donnent :

$$C_p(t) = A\ e^{-i \frac{E_p}{\hbar} t}$$

$C_q(t) = B\, e^{-i \frac{E_q}{\hbar} t}$ où A et B sont des fonctions dépendant du temps.

Nous calculons A et B en appliquant la méthode de variation des constantes. Nous obtenons :

$$i\hbar\, \dot{C}_p(t) = i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} e^{-i \frac{E_p}{\hbar} t} = -\frac{1}{2} \mu_{pq} E_o\, e^{i\omega t} B\, e^{-i \frac{E_q}{\hbar} t}$$

$$i\hbar\, \dot{C}_q(t) = i\hbar \frac{\partial B}{\partial t} e^{-i \frac{E_q}{\hbar} t} = -\frac{1}{2} \mu_{qp} E_o\, e^{-i\omega t} A\, e^{-i \frac{E_p}{\hbar} t} \qquad 1(II-5)$$

soit :

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + i(\omega_o - \omega) \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{|\mu_{pq}|^2 E_o^2}{4\hbar^2} A = o$$

et une équation similaire pour B :

posons : $\gamma^2 = (\omega_o - \omega)^2 + \frac{|\mu_{pq}|^2 E_o^2}{\hbar^2}$

Les fonctions A et B s'écrivent :

$$A = e^{i \frac{\omega - \omega_o}{2} t} \left[K_1 \cos \frac{\gamma t}{2} + K_2 \sin \frac{\gamma t}{2} \right]$$

$$B = e^{i \frac{\omega_o - \omega}{2} t} \left[K_3 \cos \frac{\gamma t}{2} + K_4 \sin \frac{\gamma t}{2} \right] \qquad 1(II-6)$$

où les K_i sont des coefficients que nous allons déterminer :

$C_p(t)$ et $C_q(t)$ deviennent :

$$C_p(t) = \left[K_1 \cos \frac{\gamma t}{2} + K_2 \sin \frac{\gamma t}{2} \right] e^{i \left(\frac{\omega}{2} - \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t}$$

$$C_q(t) = \left[K_3 \cos \frac{\gamma t}{2} + K_4 \sin \frac{\gamma t}{2} \right] e^{-i\left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t} \qquad ^1(II-7)$$

Pour déterminer les coefficients, nous appliquons les conditions initiales :

$$C_p(o) = 1$$
$$C_q(o) = o$$

avec : $t_o = o$

c'est-à-dire que nous supposons qu'à l'instant initial toutes les molécules sont dans l'état p. Nous avons donc :

$$K_1 = 1, \qquad K_3 = o$$

et :

$$C_p(t) = \left[\cos \frac{\gamma t}{2} + K_2 \sin \frac{\gamma t}{2} \right] e^{i \left(\frac{\omega}{2} - \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t}$$

$$C_q(t) = K_4 \sin \frac{\gamma t}{2} e^{-i \left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t}$$

il reste à déterminer K_2 et K_4 en appliquant $^1(II-4)$ à l'instant initial. De ces deux équations nous déduisons :

$$K_2 = i \frac{\omega_o - \omega}{\gamma}$$

$$K_4 = i \frac{\mu_{qp} E_o}{\gamma \hbar}$$

d'où :

$$C_p(t) = \left[\cos\frac{\gamma t}{2} + i\,\frac{\omega_o - \omega}{\gamma}\sin\frac{\gamma t}{2}\right] e^{\,i\left(\frac{\omega}{2} - \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t}$$

$$C_q(t) = i\,\frac{\mu_{qp} E_o}{\gamma \hbar}\sin\frac{\gamma t}{2}\, e^{\,-i\left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t} \qquad (II-8)$$

$|C_q(\tau)|^2$ donne la probabilité de transition dans la cavité, τ étant la durée d'interaction ou le temps de vol dans cette cavité.

Soit maintenant une molécule qui traverse une première cavité pendant un temps τ, passe dans un espace libre où elle n'est soumise à aucune perturbation pendant un temps T et traverse une deuxième cavité de même longueur que la première. Nous calculons la probabilité de transition dans ce système. A cet effet nous cherchons $C_q(\tau + T)$ où T est le temps mis par les molécules pour franchir l'espace entre les deux cavités.

$$C_q(\tau + T) = \left\{ C_q(\tau)\left[\cos\frac{\gamma_1 T}{2} - i\,\frac{\omega_o - \omega}{\gamma_1}\sin\frac{\gamma_1 T}{2}\right] + i\,\frac{\mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \hbar}\sin\frac{\gamma_1 T}{2}\, C_p(\tau)\, e^{-i\omega\tau} \right\} e^{\,-i\left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) T} \qquad (II-9)$$

Si nous supposons que dans la région entre les deux cavités il ne règne aucun champ électrique, nous avons $E_1 = E_o$ pendant le temps $t < \tau$ et $E_1 = o$ pour $\tau < t < T$.

d'où : $\gamma_1 = \omega_o - \omega$

A l'entrée de la cavité, nous avons alors :

$$C_q(\tau+T) = C_q(\tau)\left[\cos\frac{(\omega_o-\omega)T}{2} - i\sin\frac{(\omega_o-\omega)T}{2}\right] e^{-i\left(\frac{\omega}{2}+\frac{E_1+E_q}{2\hbar}\right)T}$$

soit :

$$C_q(\tau+T) = C_q(\tau)\, e^{-i\frac{E_q}{\hbar}T} \qquad 1(II..10)$$

de même :

$$C_p(\tau+T) = \left\{C_p(\tau)\left[\cos\frac{\gamma_1 T}{2} + i\,\frac{\omega_o-\omega}{\gamma}\sin\frac{\gamma_1 T}{2}\right] + i\,\frac{\mu_{qp}E_1}{\gamma_1\hbar}\sin\frac{\gamma_1 T}{2}\, C_q(\tau)\, e^{i\omega\tau}\right\} e^{i\left(\frac{\omega}{2}-\frac{E_p+E_q}{2\hbar}\right)T} \qquad 1(II-11)$$

et à l'entrée de la deuxième cavité nous avons avec les mêmes conditions :

$$C_p(\tau+T) = C_p(\tau)\, e^{-i\,E_p/\hbar\, T} \qquad 1(II-12)$$

Nous calculons à présent :

$$C_q(2\tau+T)$$

pour ce faire nous reprenons le résultat 1(II-9)et nous faisons la transformation :

$$\tau \longrightarrow \tau+T$$

$$T \longrightarrow \tau$$

ce qui revient à changer de conditions initiales.

Nous obtenons :

$$C_q(2\tau + T) = 2i \frac{\mu_{qp} E_o}{\gamma \hbar} \sin \frac{\gamma \tau}{2} \left[\cos \frac{\gamma \tau}{2} \cos \frac{\delta T}{2} - \frac{\delta}{\gamma} \sin \frac{\gamma \tau}{2} \sin \frac{\delta T}{2} \right] x$$

$$e^{-i\left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) T} \qquad 1(II-13)$$

Nous en déduisons la probabilité de transition ;

$$P = |C_q(2\tau + T)|^2 = 4 \frac{|\mu_{qp}|^2 E_o^2}{\gamma^2 \hbar^2} \sin^2 \frac{\gamma \tau}{2} \; x$$

$$\left[\cos \frac{\gamma \tau}{2} \cos \frac{\delta T}{2} - \frac{\delta}{\gamma} \sin \frac{\gamma \tau}{2} \sin \frac{\delta T}{2} \right]^2$$

1 (II-14)

Jusqu'à présent nous n'avons fait aucune hypothèse sur la vitesse des molécules, c'est-à-dire sur le temps de vol. Les molécules n'ont pas toutes la même vitesse et obéissent à la statistique de MAXWELL - BOLTZMANN, en particulier en ce qui concerne la distribution des vitesses. La vitesse la plus probable, est donnée par $\alpha = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$. Dans nos conditions expérimentales, T = 300°K α = 660 m/s.

Si dN est le nombre de molécules dont la vitesse est comprise entre v et v + dv, et si N est le nombre total de molécules dans un certain volume de gaz, la loi de distribution se présente comme suit :

$$\frac{dN}{dv} = \frac{4N}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\alpha^3} \; v^2 \; e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}}$$

Ceci n'est pas valable dans un faisceau car la probabilité qu'a une molécule de sortir de la source est proportionnelle à

la vitesse moléculaire. La fonction de distribution est proportionnelle à $\frac{dN}{dv}$ multipliée par v, la constante de proportionnalité étant obtenue en normalisant sur l'intensité du faisceau I_o.

$$I(v) = \frac{2I_o}{\alpha^4} v^3 e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}}$$

La probabilité moyenne P est,

si 1 est la longueur des cavités avec 1 = v

si L est la distance entre les 2 cavités avec L = vT

$$\overline{P} = \int_o^\infty \frac{2I_o P}{\alpha^4} v^3 e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}} dv \quad \text{soit :}$$

$$\overline{P} = 4 \frac{|\mu_{qp}|^2 E_o^2}{\gamma^2 \hbar^2} \frac{2I_o}{\alpha^4} \int_o^\infty v^3 e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}} \sin^2 \frac{\gamma 1}{2v} \times$$

$$\left[\cos \frac{\gamma 1}{2v} \cos \frac{\delta L}{2v} - \frac{\delta}{\gamma} \sin \frac{\gamma 1}{2v} \sin \frac{\delta L}{2v}\right]^2 dv \qquad 1(II\text{-}15)$$

posons $v = \alpha y$

$$\overline{P} = 8 \frac{|\mu_{qp}|^2 E_o^2 I_o}{\gamma^2 \hbar^2} \int_o^\infty y^3 e^{-y^2} \sin^2 \frac{\gamma 1}{2\alpha y} \times$$

$$\left[\cos \frac{\gamma 1}{2\alpha y} \cos \frac{\delta L}{2\alpha y} - - \sin \frac{\gamma 1}{2\alpha y} \sin \frac{\delta L}{2\alpha y}\right]^2 dy \qquad 1(II\text{-}16)$$

Nous appliquons les relations de la trigonométrie et nous posons :

$$A = \frac{|\mu_{qp}|^2 E_o^2 I_o}{\gamma^2 \hbar^2}$$

Nous obtenons :

$$\overline{P} = A\left\{\frac{1}{2}\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\, dy + \frac{3}{2}\,\frac{\delta^2}{\gamma^2}\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\, dy\right.$$

$$- \frac{1}{4}\left(1 + 2\,\frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right)\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\cos\frac{2\,\gamma 1 + \delta L}{\alpha\, y}\, dy$$

$$- \frac{1}{4}\left(1 - 2\,\frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right)\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\cos\frac{2\,\gamma 1 + \delta L}{\alpha\, y}\, dy$$

$$+ \frac{\delta}{\gamma}\left(1 + \frac{\delta}{\gamma}\right)\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\cos\frac{\gamma 1 + \delta L}{\alpha\, y}\, dy$$

$$- \frac{\delta}{\gamma}\left(1 - \frac{\delta}{\gamma}\right)\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\cos\frac{\gamma 1 - \delta L}{\alpha\, y}\, dy$$

$$- 2\,\frac{\delta^2}{\gamma^2}\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\cos\frac{\gamma 1}{\alpha y}\, dy$$

$$- \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right)\int_0^\infty y^3\, e^{-y^2}\cos\frac{2\,\gamma 1}{\alpha\, y}\, dy$$

$$\left. + \frac{1}{2}\left(1 - 3\,\frac{\delta^2}{\gamma^2}\right)\int_0^\infty y^2\, e^{-y^2}\cos\frac{\delta L}{\alpha y}\, dy\right\}$$

1(II-17)

La fonction :

$$I(x) = \int_0^\infty y^3 \, e^{-y^2} \cos \frac{x}{y} \, dy \qquad 1(II-18)$$

a été établie par Ramsey (Appendix D, Molecular Beams B.14)

La probabilité moyenne s'écrit (fonction I) :

$$\bar{P} = A \left\{ \frac{1}{4} \left(1 + 3 \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) - \frac{1}{4} \left(1 + 2 \frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) I \left(\frac{2\gamma 1 + \delta L}{\alpha}\right) \right.$$

$$- \frac{1}{4} \left(1 - 2 \frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) I \left(\frac{2\gamma 1 - \delta L}{\alpha}\right)$$

$$+ \frac{\delta}{\gamma} \left(1 + \frac{\delta}{\gamma}\right) I \left(\frac{\gamma 1 + \delta L}{\alpha}\right) - \frac{\delta}{\gamma} \left(1 - \frac{\delta}{\gamma}\right) I \left(\frac{\gamma 1 - \delta L}{\alpha}\right)$$

$$- \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) I \left(\frac{2\gamma 1}{\alpha}\right) - 2 \frac{\delta^2}{\gamma^2} I \left(\frac{\gamma 1}{\alpha}\right)$$

$$\left. + \frac{1}{2} \left(1 - 3 \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) I \left(\frac{\delta L}{\alpha}\right) \right\}$$

Remarque :

Si nous nous plaçons près de la résonance, l'expression 1(II-16) devient :

$$\bar{P} = 2A \int_0^\infty y^3 \, e^{-y^2} \sin^2 \frac{\mu_{qp} E_o 1}{\alpha y} \cos^2 \frac{\delta L}{2\alpha y} \, dy$$

et nous retrouvons le résultat de Ramsey

$$\bar{P} = A \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{4} I \left(\frac{2 \mu_{qp} E_o 1 + \delta L}{\alpha}\right) - \frac{1}{4} I \left(\frac{2 \mu_{qp} E_o 1 - \delta L}{\alpha}\right) \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} I \left(\frac{2 \mu_{qp} E_o 1}{\alpha}\right) + \frac{1}{2} I \left(\frac{\delta L}{\alpha}\right) \right] \qquad 1(II-19)$$

B/ -Application à la forme de la raie 3-3 :

Nous avons calculé les courbes $\bar{P}$ en fonction de δ en prenant pour élément de matrice (B.19 p.74)

$$|\mu_{qp}|^2 = \mu^2 \frac{K^2}{J(J+1)} \qquad 1(II-20)$$

où la quantité μ représente le moment dipolaire usuel, calculé sans tenir compte de l'inversion et en prenant la molécule dans sa configuration pyramidale normale, alors :

$$\mu = 1{,}468 \text{ debye}$$

$$|\mu_{qp}|^2 = \frac{(1{,}468)^2}{12}$$

Sur la figure 9 nous avons représenté la forme typique d'une courbe de RAMSEY. Nous voyons que celle-ci comporte en particulier un pic central, dont la largeur à mi-hauteur dépend de E_o et de L, mais sa valeur reste assez faible ($\Delta\nu/2$ = 560 Hz).

Nous avons calculé* une série de courbes, en supposant les deux cavités distantes de un mètre (L = 1 m) pour différentes valeurs de l'amplitude E_o du champ électrique. La demi-largeur de raie évolue d'abord de manière sensiblement linéaire (figure 10) quand E_o est petit, puis tend vers une limite quand E_o croît. Nous avons pris 0,05 v/m < E_o < 10 v/m, en tenant compte du fait que la puissance émise par un maser fonctionnant en oscillations est de l'ordre de 10^{-10} Watt.

* Les calculs ont été effectués sur machine CAB-500 par le Laboratoire d'Informatique de la Faculté des Sciences. Pour simplifier les courbes calculées représentent $\bar{P}/I_o$.

FORME GENERALE DE LA RAIE DE RESONANCE

OBTENUE AVEC UN SYSTEME A DEUX CAVITES

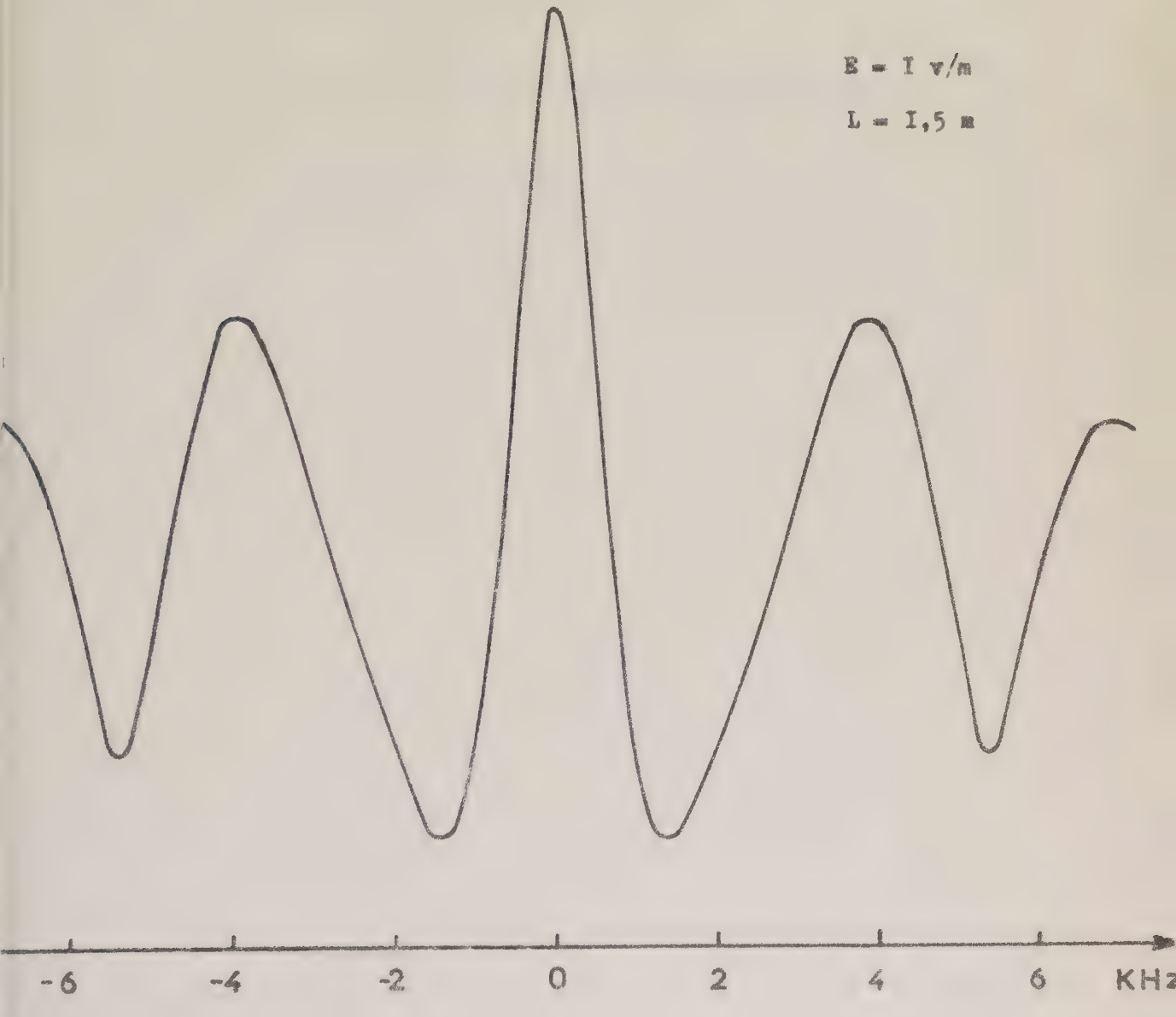


Fig. 9

Demi-largeur en fonction de l'amplitude du champ électrique

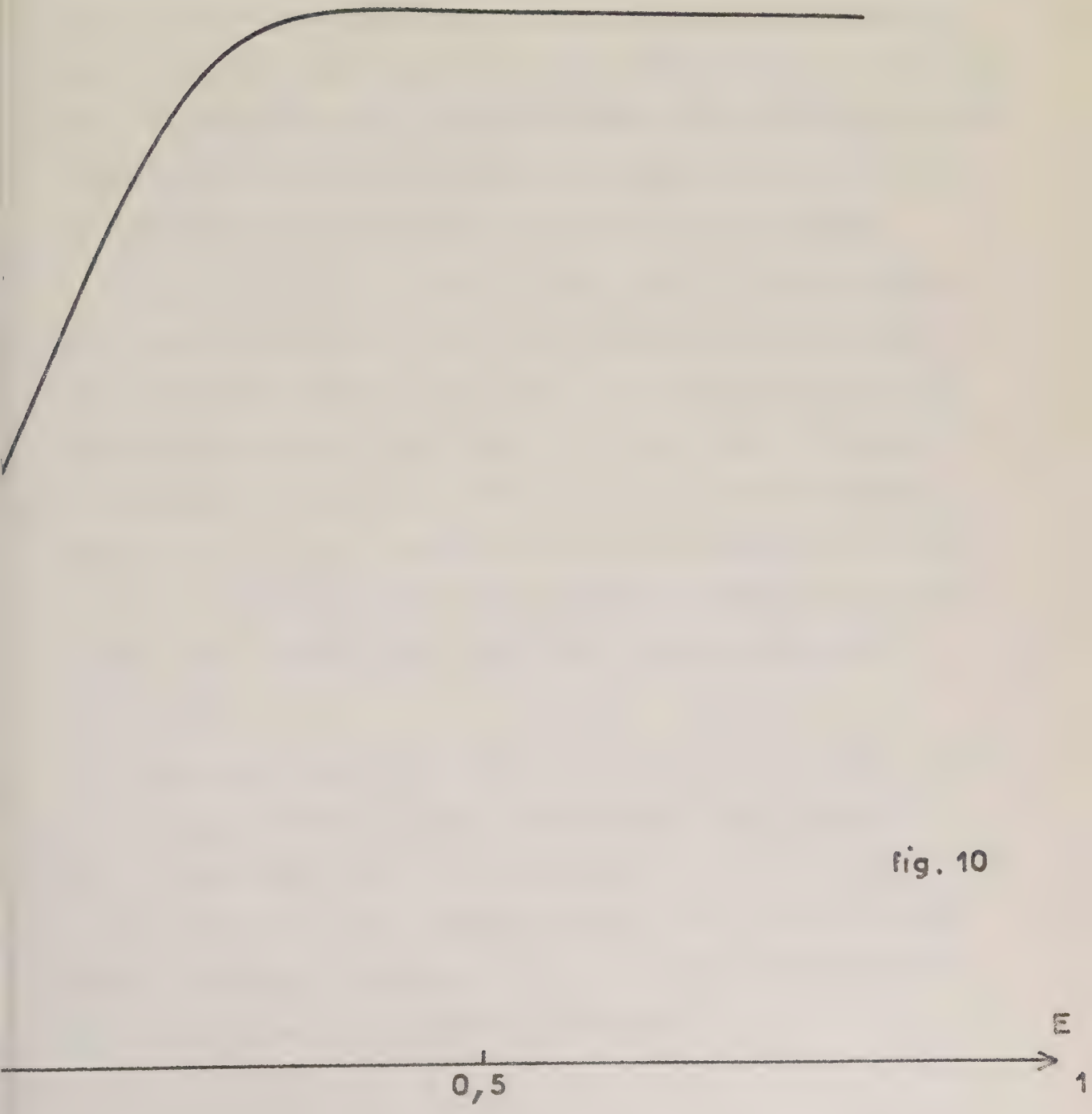


fig. 10

Sur les figures 11 à 17 nous avons représenté quand E_o varie la forme de la raie de résonance pour J = 3, K = 3, en effectuant une superposition linéaire des trois composantes suivant les caractéristiques exprimées dans le tableau (II-3), page 34. Pour L = 1 m, les deux composantes principales sont bien résolues quand les champs électriques ont une amplitude $E_o < 0,2$ v/m, les pics correspondent alors, avec une bonne approximation, aux fréquences naturelles de ces deux composantes. Pour $E_o > 0,2$ v/m les composantes ne sont plus que partiellement résolues.

Une autre série de courbes montre que la demi-largeur de raie à mi-hauteur varie comme 1/L (figure 18), c'est-à-dire comme 1/T, T étant le temps de vol entre les deux cavités, quand E_o reste constant. Nous avons pris E_o = 1 v/m. Sur les figures 19 à 26, nous avons représenté la forme de la raie de résonance en fonction de L et nous voyons que dans ces conditions, la résolution des deux composantes principales ne commence à intervenir que pour une distance entre les deux cavités assez grande ($L > 0,9$ m).

Nous avons trouvé ces résultats dans les conditions idéales où les champs électriques qui règnent dans les cavités (I) et (II) ont même amplitude et sont en phase. Si ces conditions ne sont pas réalisées, les courbes subissent des distorsions, qui peuvent introduire des erreurs dans les mesures, et que nous sommes, par conséquent, amenés à étudier.

FORME DE LA RAIE DE RESONANCE

EN FONCTION DU CHAMP ELECTRIQUE E POUR L = 1 m

(amplitude arbitraire)

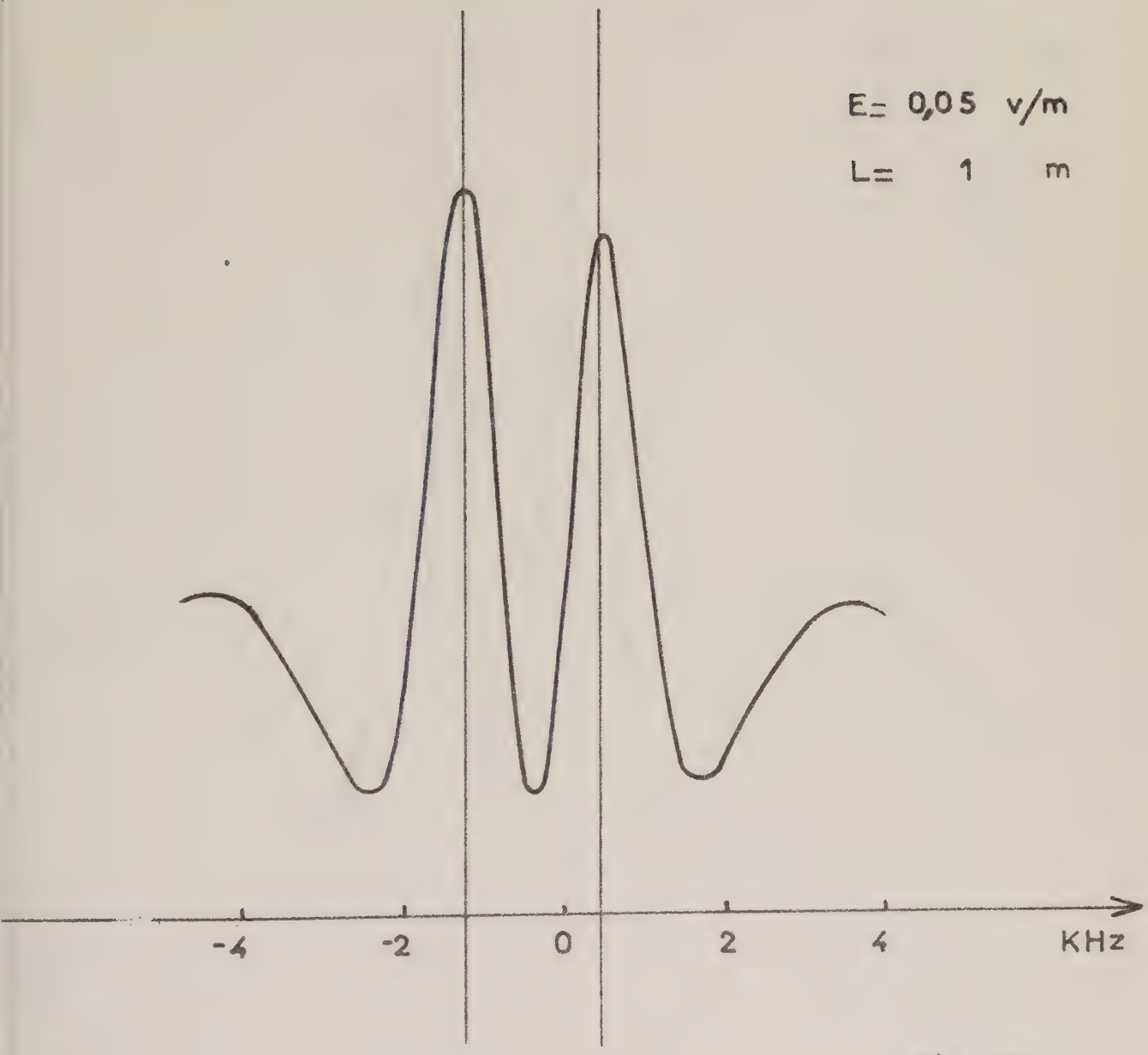


Fig. 11

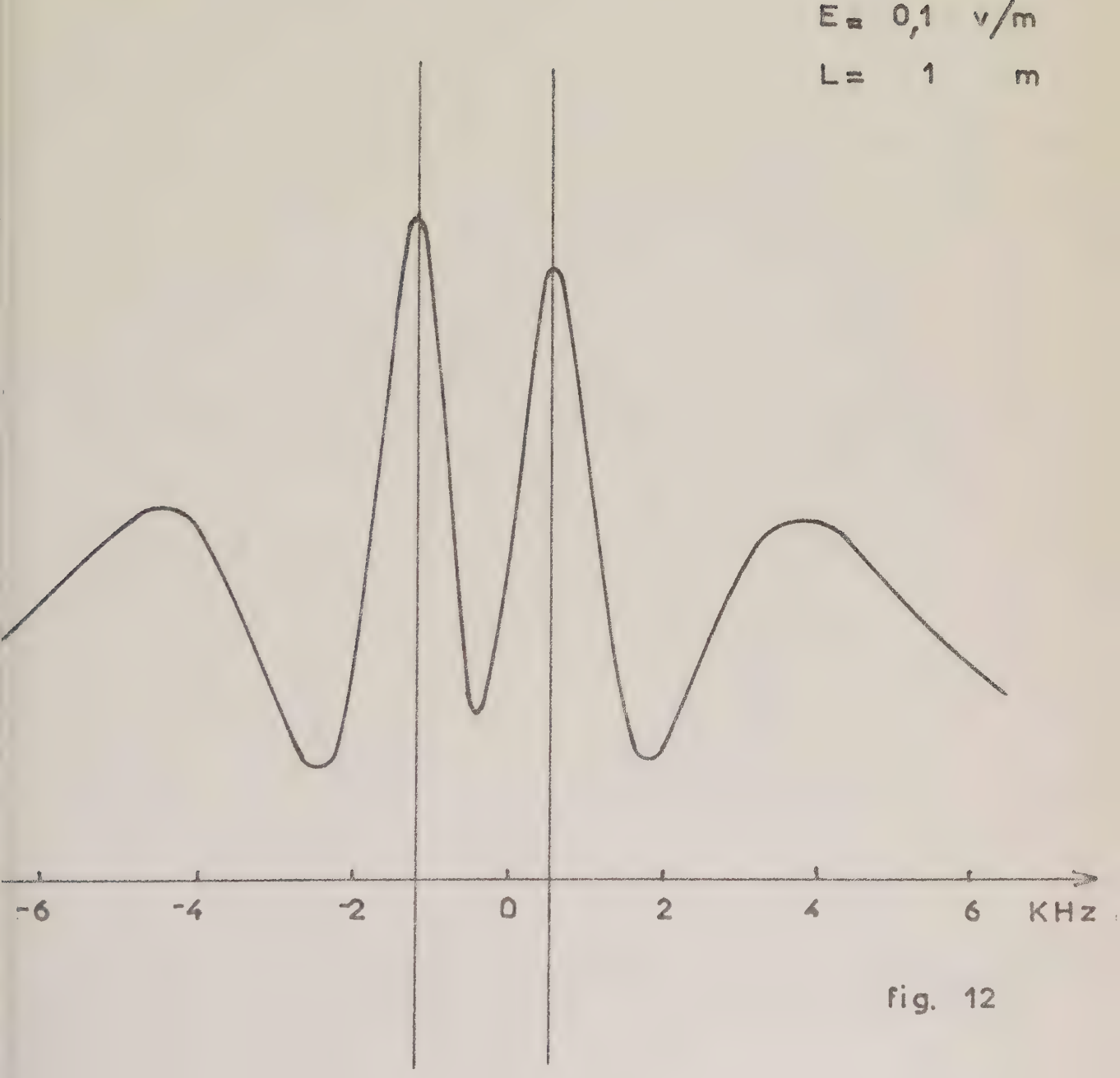


fig. 12

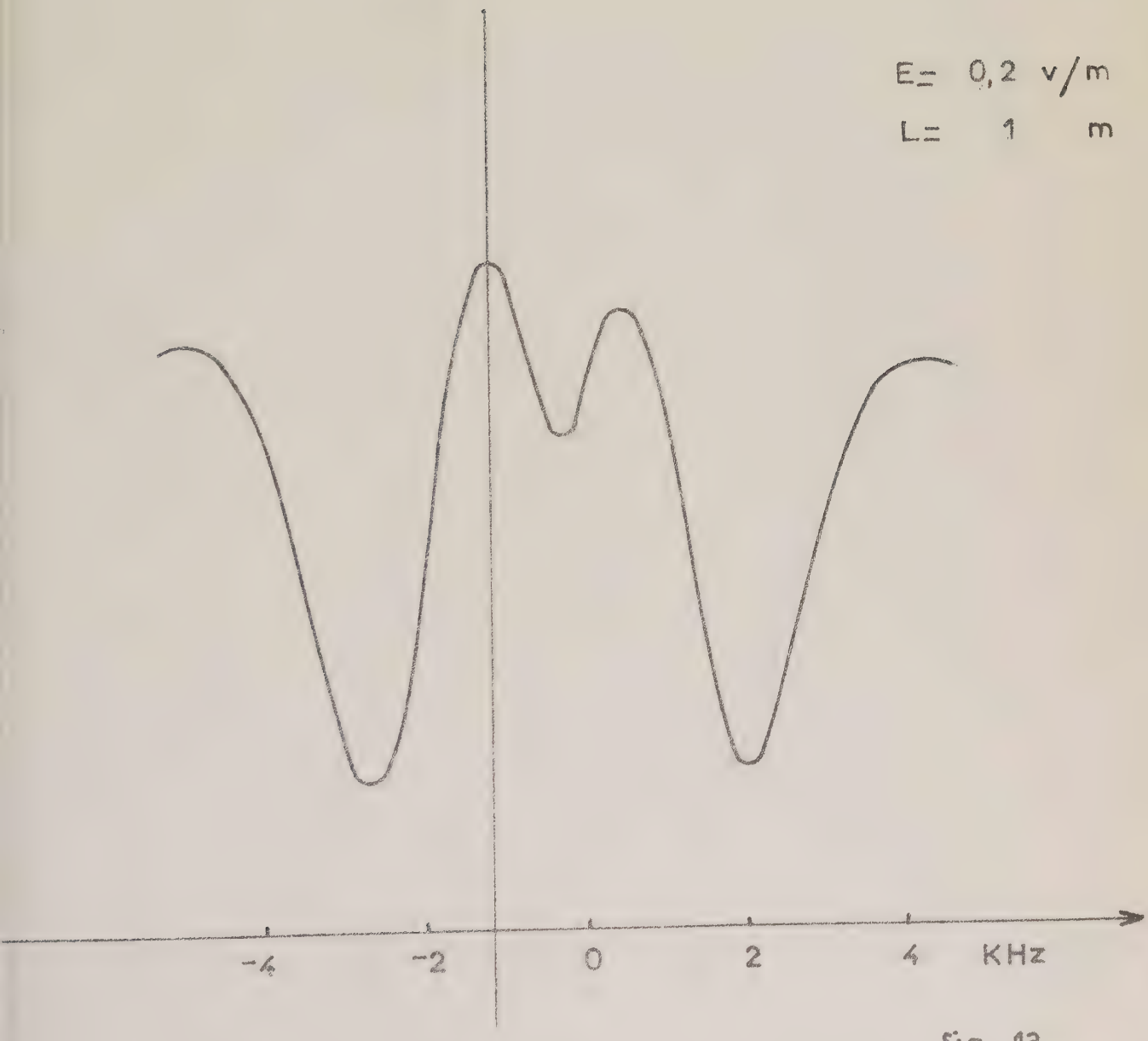


fig. 13

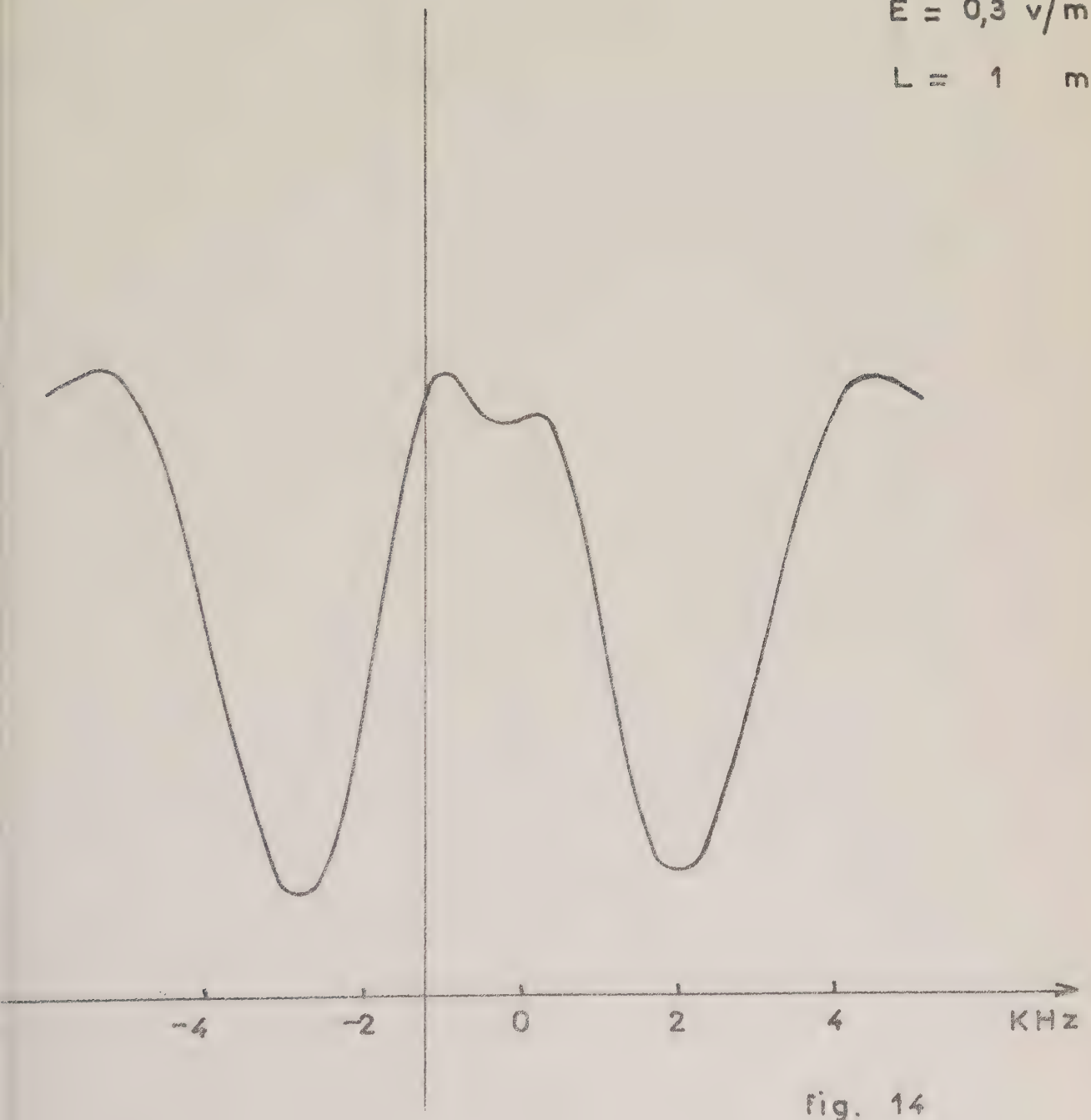


fig. 14

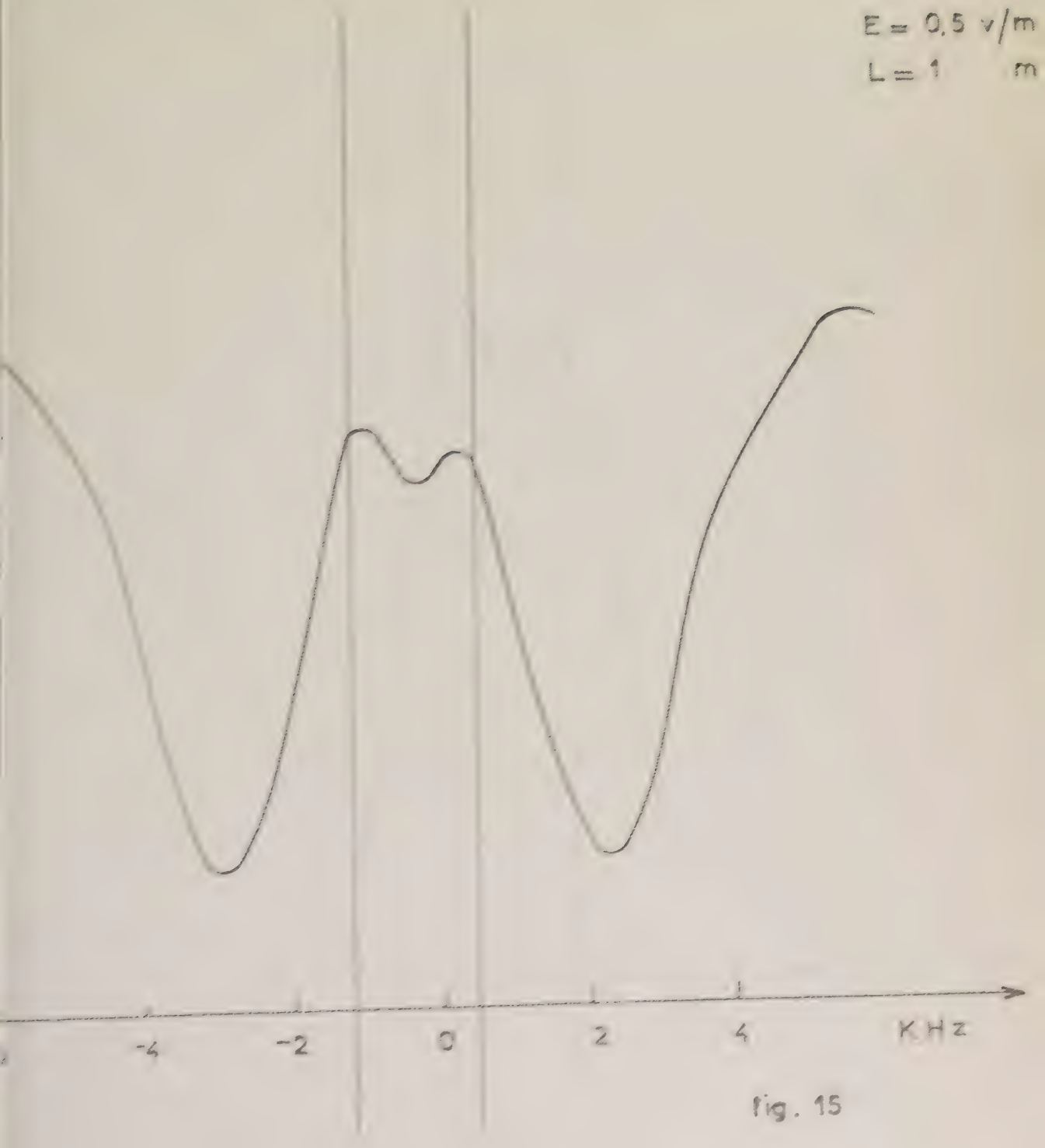


fig. 15

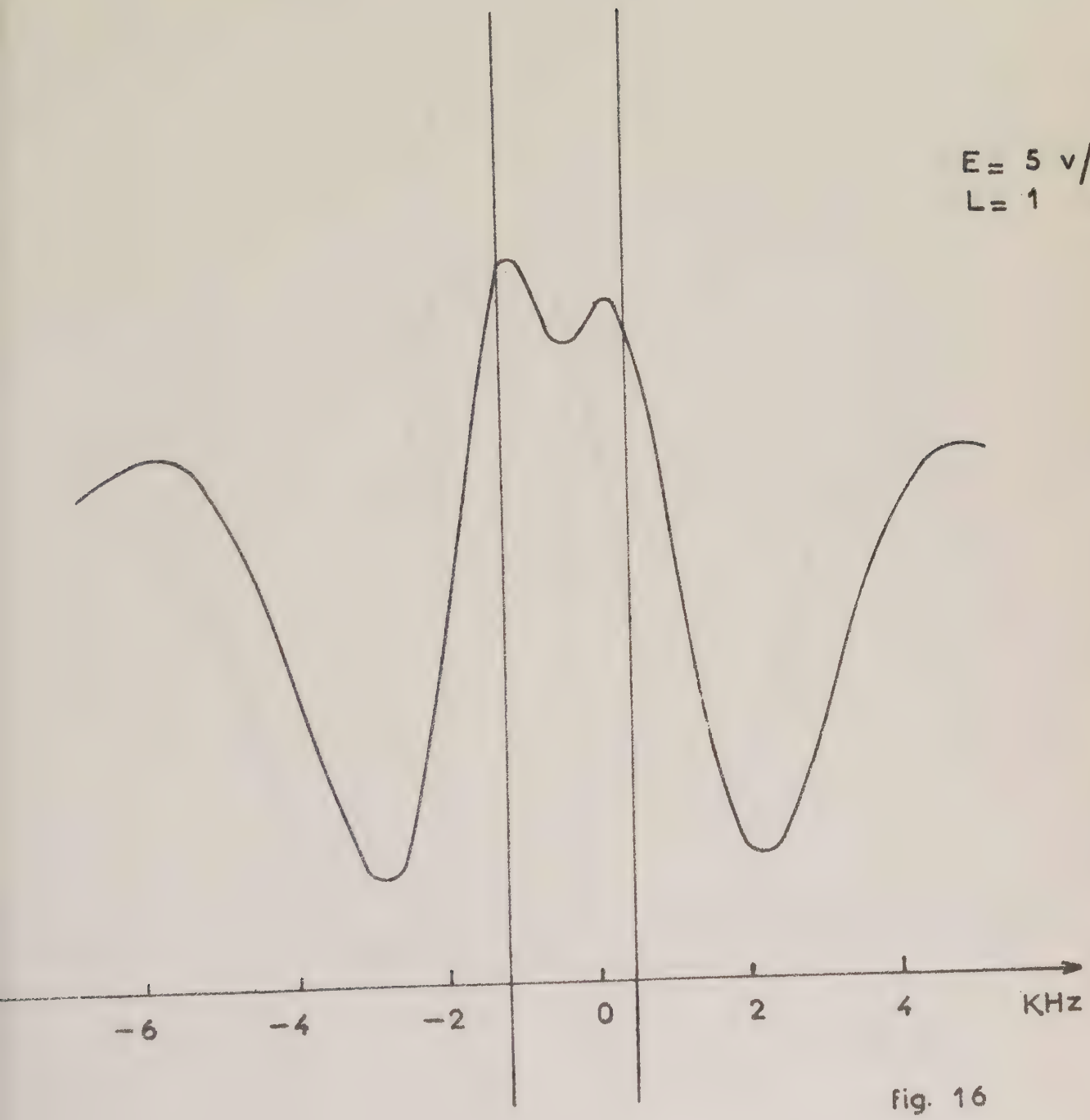


Fig. 16

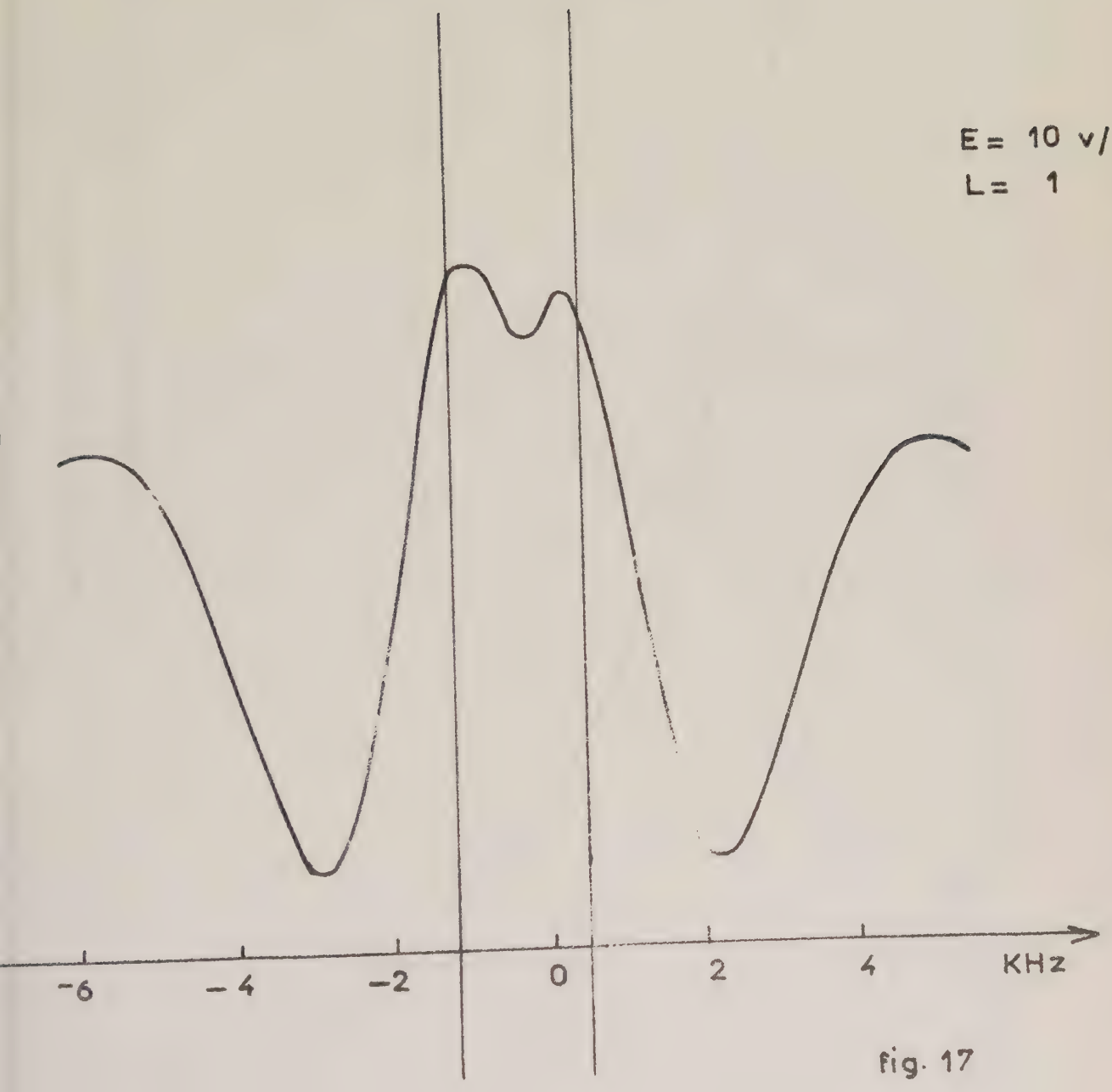


fig. 17

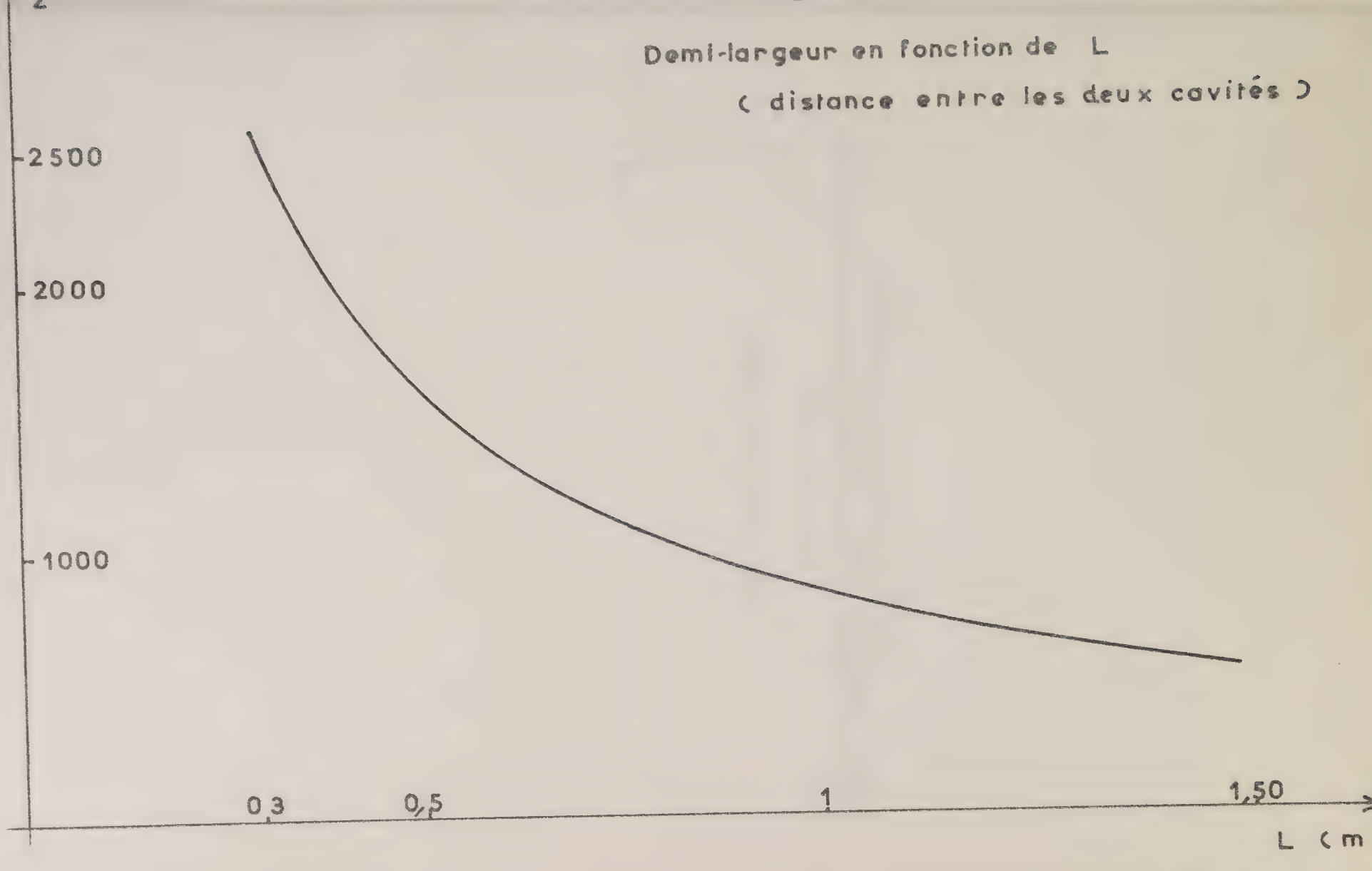

Demi-largeur en fonction de L
(distance entre les deux cavités)
2500
2000
1000
0,3
0,5
1
1,50
L (m

fig. 18

FORME DE LA RAIE DE RESONANCE

EN FONCTION DE LA DISTANCE L ENTRE LES DEUX CAVITES

POUR E = 1 V/m

(amplitude arbitraire)

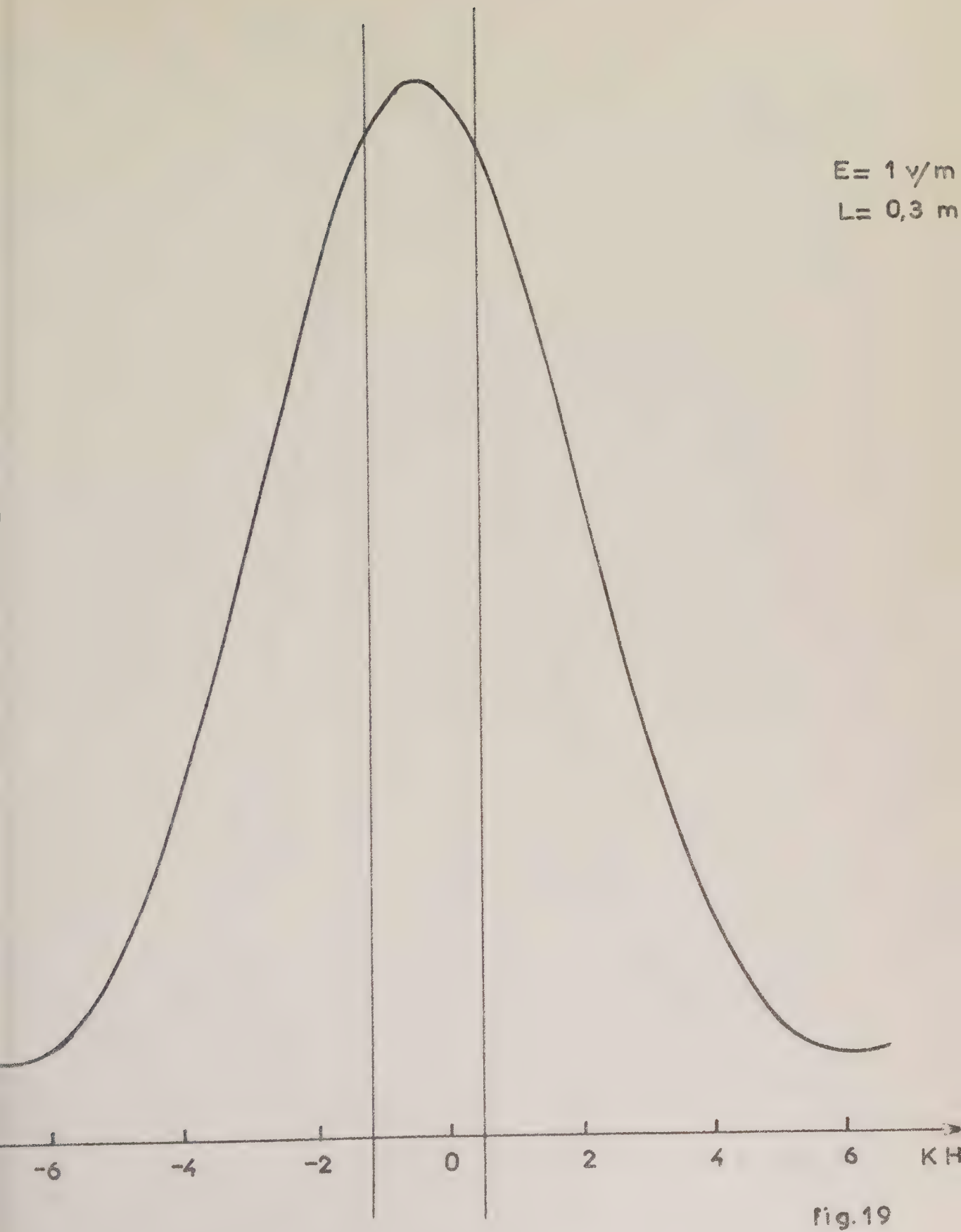


Fig. 19

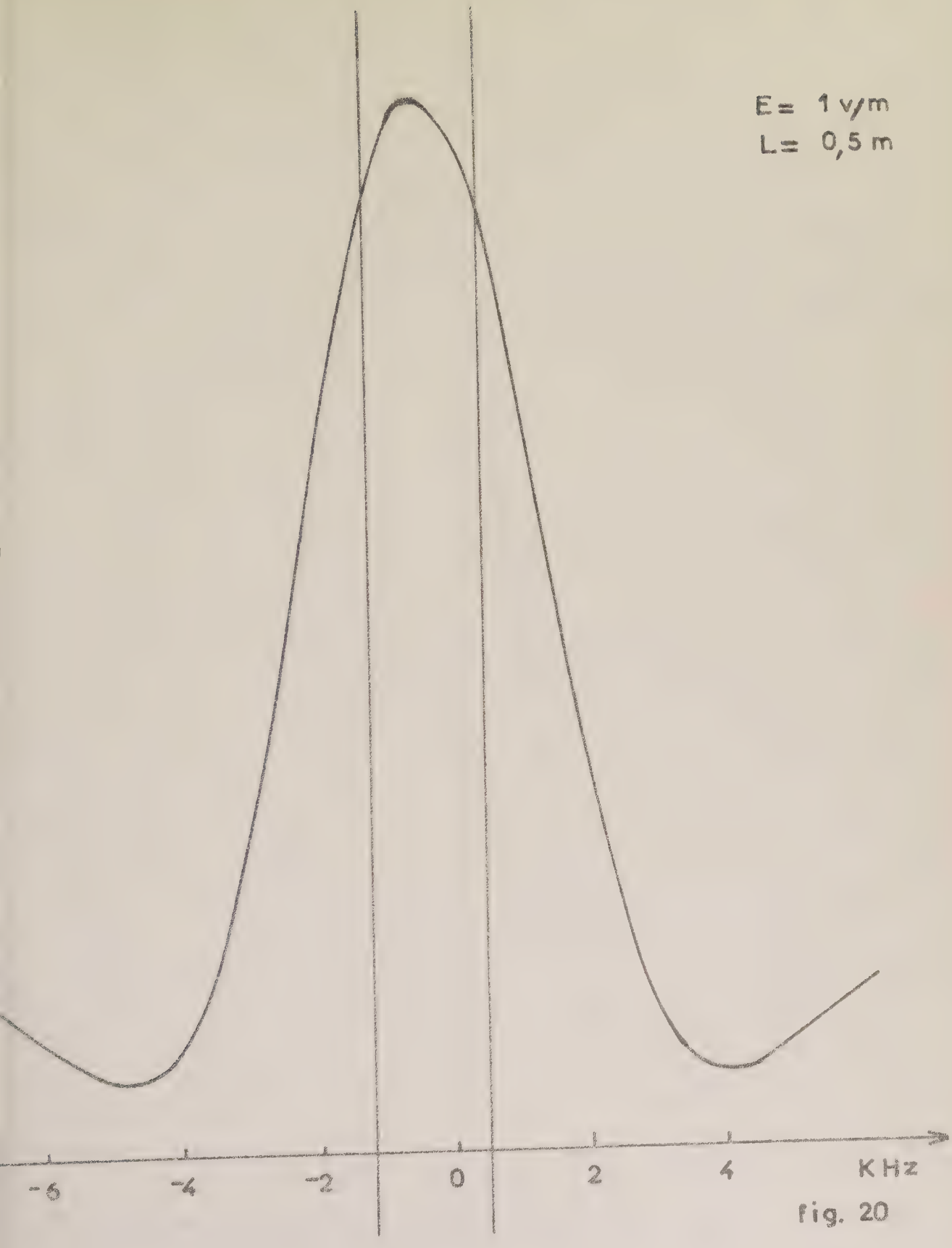


fig. 20

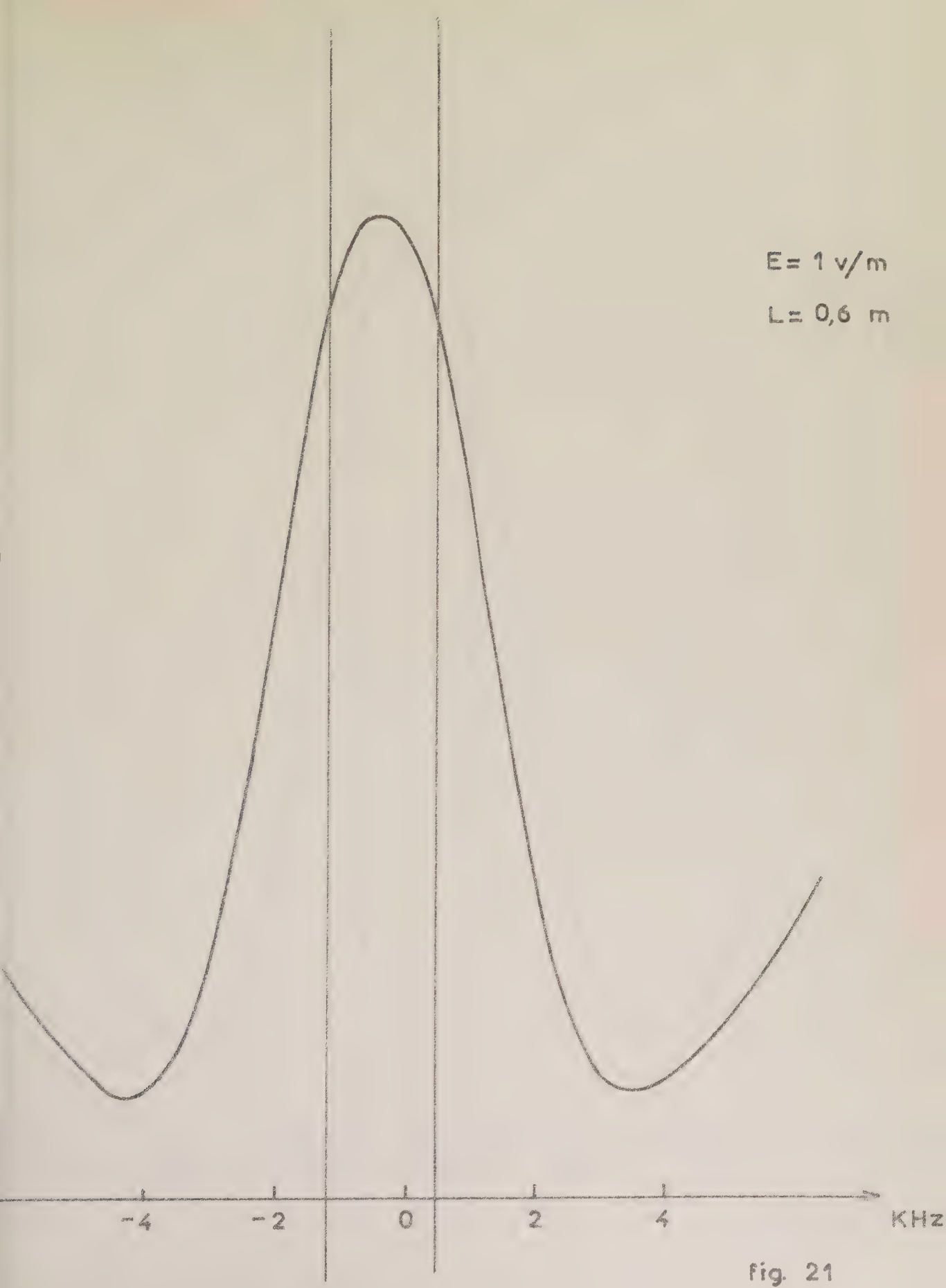


Fig. 21

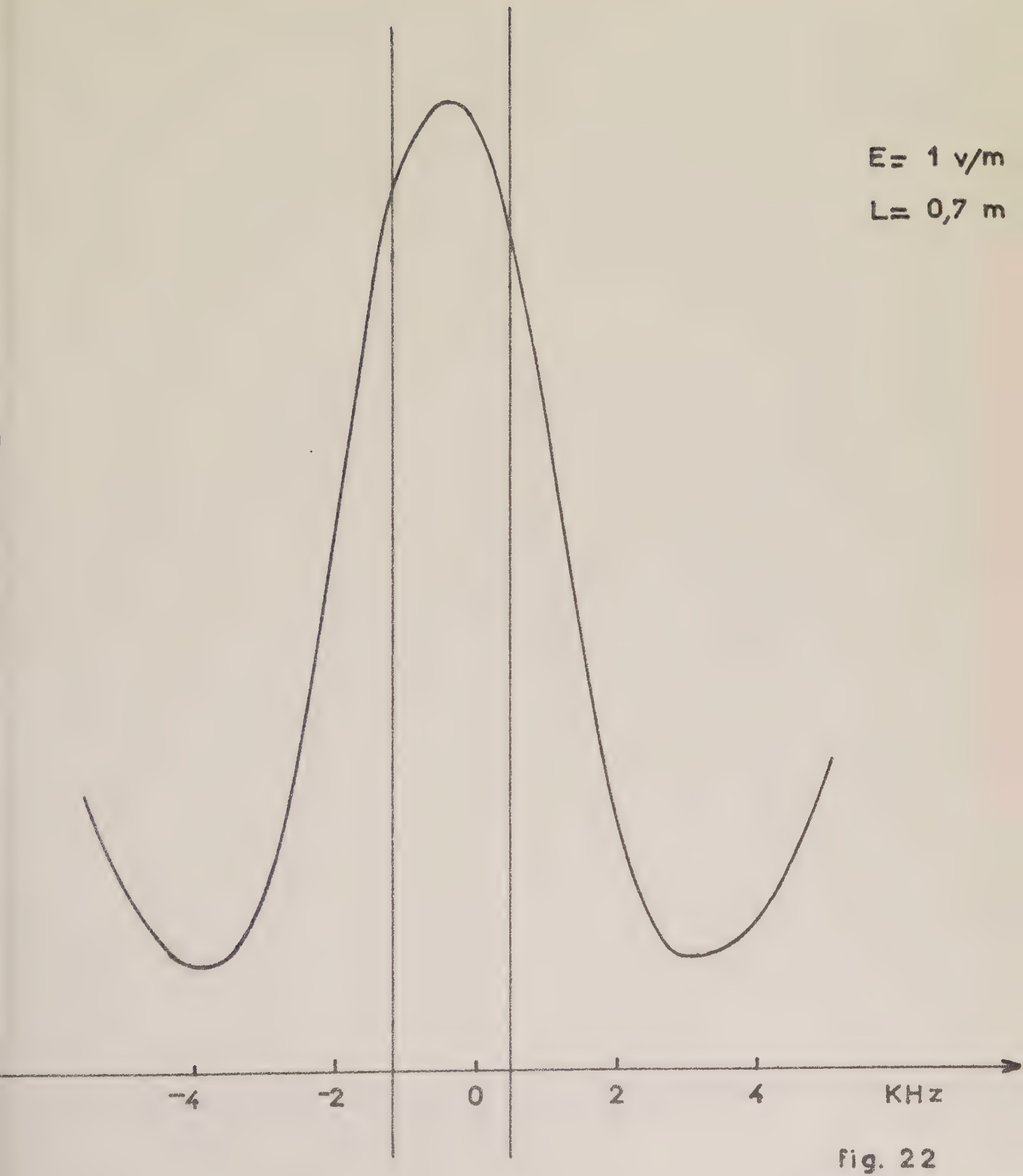


fig. 22

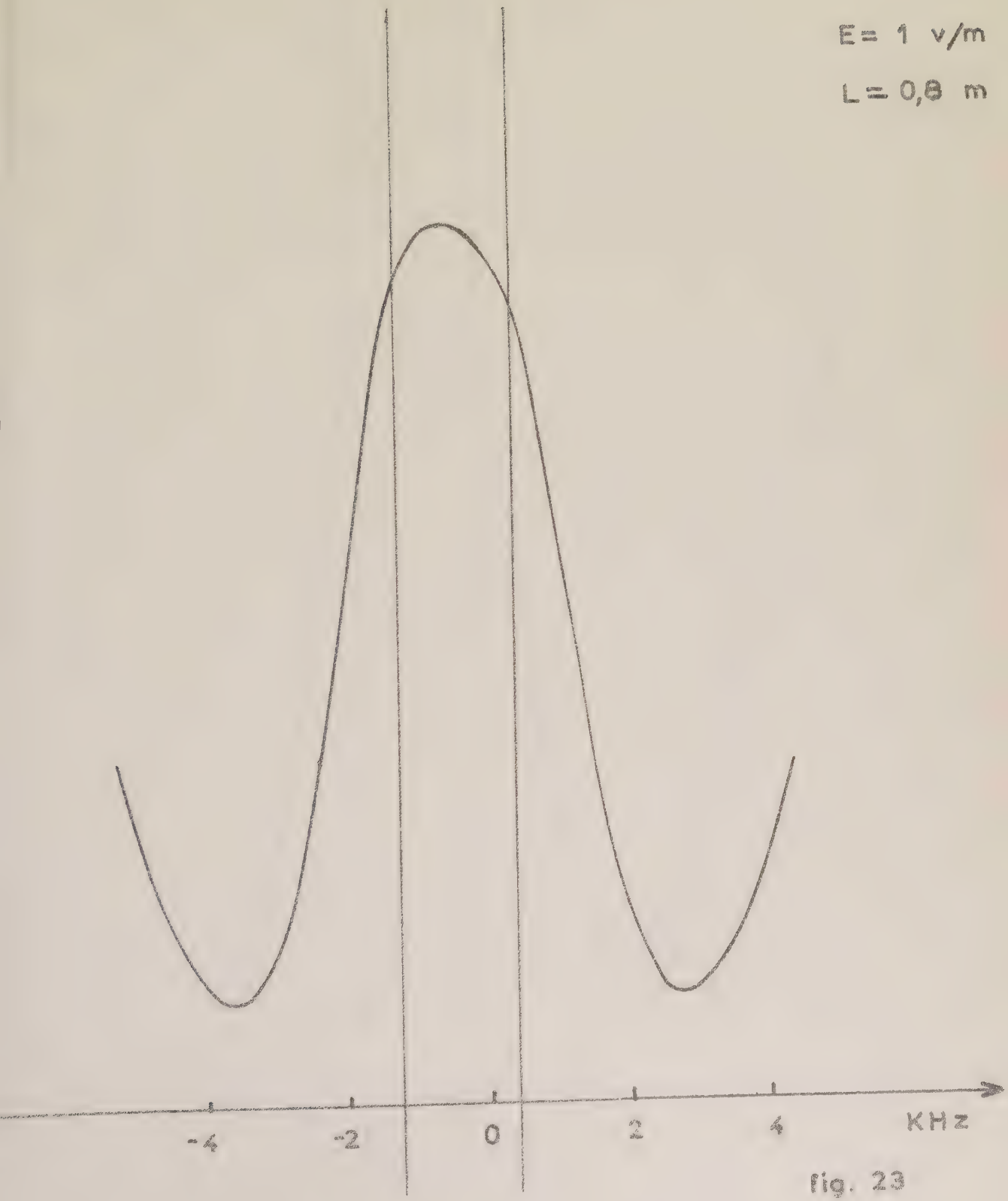


fig. 23

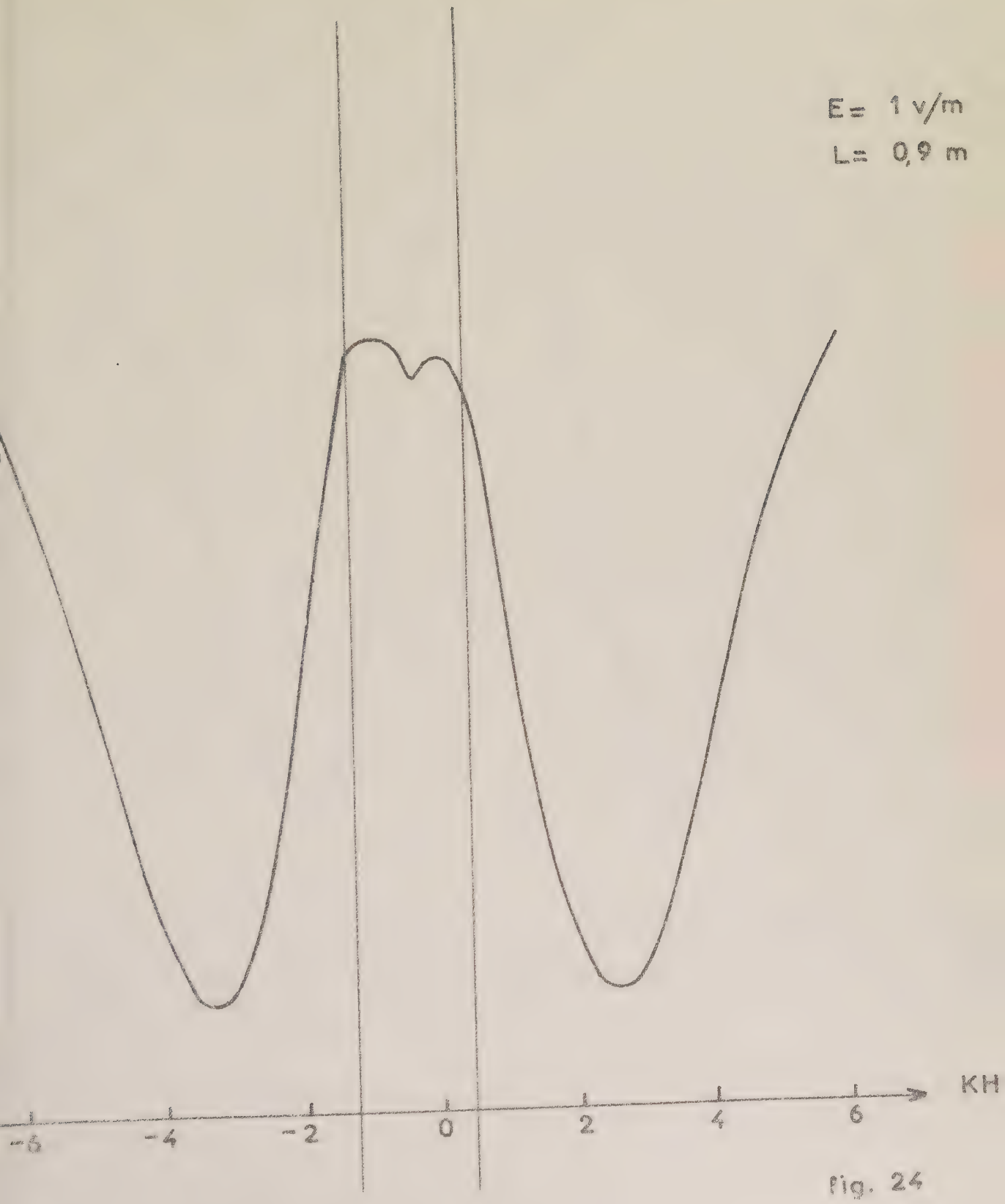


fig. 24

E = 1 v/m

L = 1 m

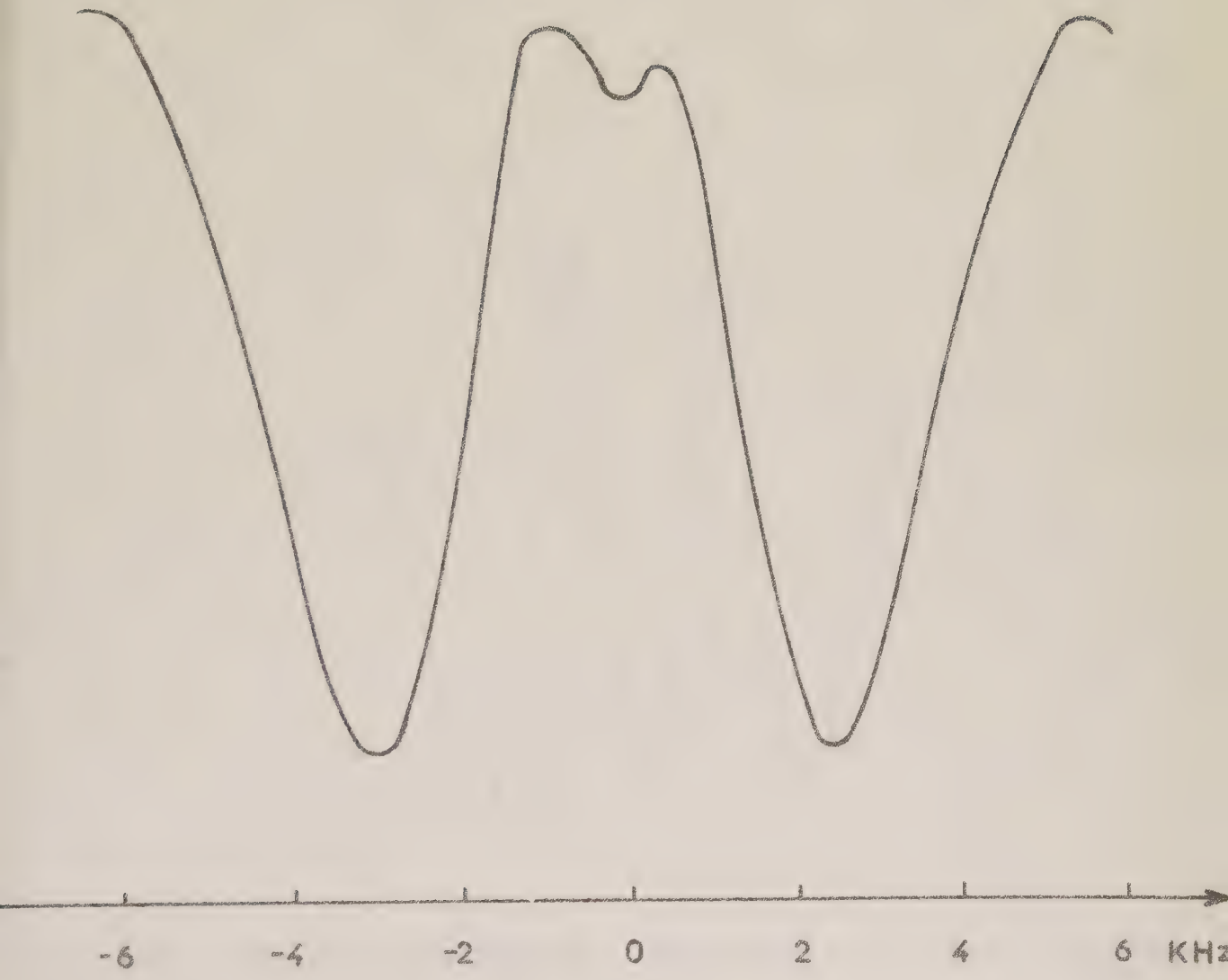


Fig. 25

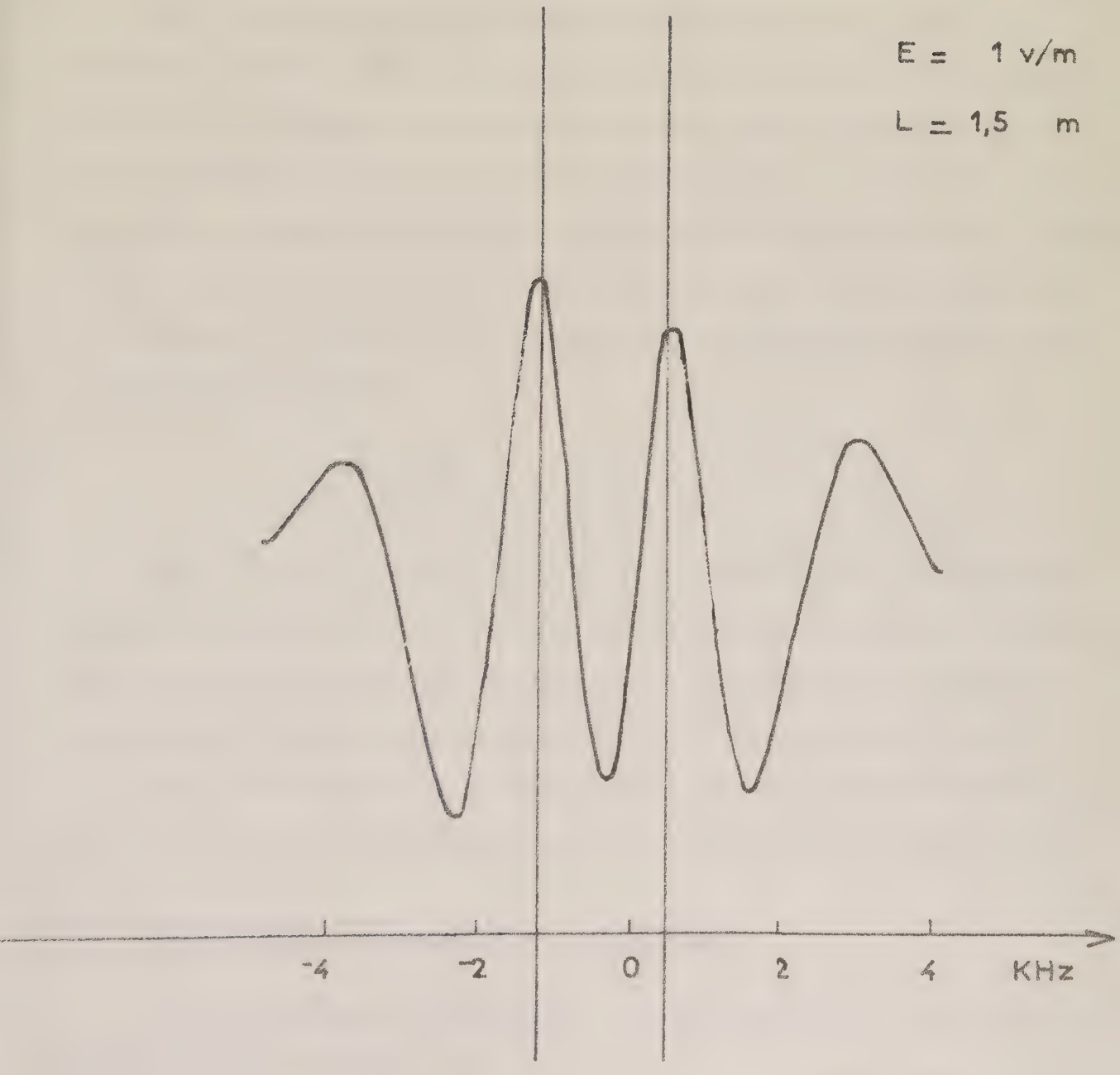


Fig. 26

II - ETUDE DES DISTORSIONS :

Nous examinerons maintenant la distorsion des courbes de résonance. Cette distorsion peut apparaître lorsque les amplitudes E_1 et E_2 des champs électriques dans les deux cavités ont des valeurs différentes ou encore lorsqu'il existe un déphasage entre ces champs électriques. L'étude de ces distorsions est essentielle car leur présence peut fausser la mesure d'une fréquence de résonance : il n'est pas certain que la fréquence mesurée sera la fréquence de BOHR :

$$\nu = \frac{E_p - E_q}{h}$$

Nous ferons le calcul dans le cas général où les amplitudes sont différentes et où il existe une différence de phase. Le résultat obtenu nous permettra d'étudier le comportement des courbes de résonance d'une part en fonction de la différence de phase en réalisant l'égalité des amplitudes E_1 et E_2, d'autre part en fonction des amplitudes différentes E_1 et E_2, en faisant $\Phi = o$

A/ -Calcul de la probabilité de transition :

Nous reprenons les formules 1(II-8) donnant C_p et C_q à la sortie de la première cavité :

$$C_p(\tau) = \left(\cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} + i \frac{\delta}{\gamma_1} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2}\right) e^{i\left(\frac{\omega}{2} - \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right)\tau}$$

$$C_q(\tau) = i \frac{\mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i \left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right)}$$

$$\text{où } \gamma_1 = \delta^2 + \frac{|\mu_{qp}|^2 E_1^2}{\hbar^2} \qquad 2(II-2)$$

A l'entrée de la deuxième cavité, $C_p(t)$ et $C_q(t)$ deviennent

$$C_p(\tau + T) = C_p(\tau) \; e^{-i \frac{E_p}{\hbar} T}$$

$$C_q(\tau + T) = C_q(\tau) \; e^{-i \frac{E_q}{\hbar} T} \qquad 2(II-3)$$

A ce moment, la molécule rencontre un champ $E_2 \cos(\omega t + \Phi)$.

Nous résolvons à nouveau les deux équations différentielles 1(II-4). Nous prenons comme conditions initiales, les valeurs de C_p et C_q à l'instant :

$$t = \tau + T$$

où la molécule entre dans la deuxième cavité,

En résolvant les équations sans second membre et en appliquant la méthode de variation des constantes nous obtenons comme précédemment :

$$C_p(t) = \left[K_1 \sin \frac{\gamma_2 t}{2} + K_2 \cos \frac{\gamma_2 t}{2} \right] e^{i\left(\frac{\omega}{2} - \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t}$$

$$C_q(t) = \left[K_3 \sin \frac{\gamma_2 t}{2} + K_4 \cos \frac{\gamma_2 t}{2} \right] e^{-i\left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t} \qquad 2(II-4)$$

Les nouvelles conditions initiales appliquées dans ces deux équations et dans les deux équations différentielles (II-4) nous permettent de déterminer les quatres coefficients :

$$K_1 = \left[\sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} + i \frac{\delta}{\gamma_1} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \right.$$

$$+ i \frac{\delta}{\gamma_2} \cos \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2}$$

$$- \frac{\delta^2}{\gamma_1 \gamma_2} \cos \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2}$$

$$\left. - \frac{|\mu_{pq}|^2 E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar^2} \cos \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i(\delta T - \Phi)} \right] e^{i \frac{\delta T}{2}}$$

$$K_2 = \left[\cos \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} + i \frac{\delta}{\gamma_1} \cos \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \right.$$

$$- i \frac{\delta}{\gamma_2} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} + \frac{\delta^2}{\gamma_1 \gamma_2} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2}$$

$$\left. + \frac{|\mu_{pq}|^2 E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar^2} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i(\delta T - \Phi)} \right] e^{i \frac{\delta T}{2}}$$

2(II-5)

Nous obtenons de même :

$$K_3 = \left[i \frac{\mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} + \frac{\delta \mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \cos \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} + \right.$$

$$+ i \frac{\mu_{qp} E_2}{\gamma_2 \hbar} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} \cos \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} e^{i(\delta T - \Phi)}$$

$$- \frac{\delta \mu_{qp} E_2}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \cos \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} e^{i(\delta T - \Phi)} \Bigg] e^{-i \frac{\delta T}{2}}$$

$$K_4 = \Bigg[i \frac{\mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \cos \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2}$$

$$- \frac{\delta \mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \sin \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2}$$

$$- i \frac{\mu_{qp} E_2}{\gamma_2 \hbar} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} \sin \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} e^{i(\delta T - \Phi)}$$

$$+ \frac{\delta \mu_{qp} E_2}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \sin \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} e^{i(\delta T - \Phi)} \Bigg] e^{-i \frac{\delta T}{2}}$$

2(II - 6)

Nous avons donc :

$$C_q(t) = \Bigg\{ \Bigg[i \frac{\mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \hbar} \sin \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}}$$

$$+ \frac{\delta \mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \cos \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}}$$

$$+ i \frac{\mu_{qp} E_2}{\gamma_2 \hbar} \cos \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{i \frac{\delta T}{2} - \Phi)}$$

$$- \frac{\delta \mu_{qp} E_2}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \cos \frac{\gamma_2(\tau + T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{i \left(\frac{\delta T}{2} - \Phi \right)} \Bigg] \sin \frac{\gamma_2 \tau}{2} +$$

$$+\left[i \frac{\mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \hbar} \cos \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}} \right.$$

$$- \frac{\delta \mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}}$$

$$- i \frac{\mu_{qp} E_2}{\gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-\left(\frac{\delta T}{2} - \phi\right)}$$

$$\left. + \frac{\delta \mu_{qp} E_2}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_2(\tau+T)}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{i \left(\frac{\delta T}{2} - \phi\right)} \right] \times$$

$$\left. \cos \frac{\gamma_2 t}{2} \right\} e^{-i \left(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar}\right) t} \qquad 2(II-7)$$

Remarque :

Il est facile de vérifier que les conditions :

$$E_1 = E_2 = E_o$$

$$\phi = o$$

$$\text{pour } t = 2\tau + T$$

conduisent au résultat (II-13).

A partir de la formule exprimant $C_q(t)$, nous calculons $C_q(2\tau + T)$

$$C_q(2\tau + T) = \left[i \frac{\mu_{qp} E_1}{\gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \cos \frac{\gamma_2 \tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}} \right.$$

$$\left. + \frac{\delta \mu_{qp} E_1}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}} + \right.$$

$$+ i \frac{\mu_{qp} E_2}{\gamma_2 \hbar} \cos \frac{\gamma_1 \tau}{2} \sin \frac{\gamma_2 \tau}{2} e^{i(\frac{\delta T}{2} - \phi)}$$

$$- \frac{\delta \mu_{qp} E_2}{\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{\gamma_1 \tau}{2} \sin \frac{\gamma_2 \tau}{2} e^{i(\frac{\delta T}{2} - \phi)} \Big] e^{-i(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar})(2\tau + T)}$$

2(II-8)

$$C_q(2\tau + T) = \Big[i \frac{\mu_{qp} E_1}{2 \gamma_1 \hbar} \sin \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)\tau}{2} e^{-i\frac{\delta T}{2}}$$

$$+ i \frac{\mu_{qp} E_1}{2 \gamma_1 \hbar} \sin \frac{(\gamma_1 - \gamma_2)\tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}}$$

$$+ \frac{\delta \mu_{qp} E_1}{2 \gamma_1 \gamma_2 \hbar} \cos \frac{(\gamma_1 - \gamma_2)\tau}{2} e^{-i\frac{\delta T}{2}} - \frac{\delta \mu_{qp} E_1}{2\gamma_1 \gamma_2 \hbar} \cos \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)\tau}{2} e^{-i \frac{\delta T}{2}}$$

$$+ i \frac{\mu_{qp} E_2}{2 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} e^{i(\frac{\delta T}{2} - \phi)} - i \frac{\mu_{qp} E_2}{2 \gamma_2 \hbar} \sin \frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} e^{i(\frac{\delta T}{2} - \phi}$$

$$- \frac{\delta \mu_{qp} E_2}{2 \gamma_1 \gamma_2 \hbar} \cos \frac{(\gamma_1 - \gamma_2)}{2} e^{i(\frac{\delta T}{2} - \phi)}$$

$$+ \frac{\delta \mu_{qp} E_2}{2 \gamma_1 \gamma_2 \hbar} \cos \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)}{2} e^{i(\frac{\delta T}{2} - \phi)} \Big] e^{-i(\frac{\omega}{2} + \frac{E_p + E_q}{2\hbar})(2\tau + T)}$$

2(II-9)

Nous en déduisons la probabilité de transition pour une molécule :

$$P = C_q^* (2\tau + T) . C_q(2\tau + T)$$

$$= \frac{|\mu_{pq}|^2}{4\hbar^2}\left\{\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)+\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\right.$$

$$-\frac{1}{2}\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)+\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\cos(\gamma_1+\gamma_2)\tau$$

$$-\frac{1}{2}\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)+\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\cos(\gamma_1-\gamma_2)\tau$$

$$-\frac{1}{2}\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(1-\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos\left[(\gamma_1+\gamma_2)\tau-\delta T+\Phi\right]$$

$$+\frac{1}{2}\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(1-\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos\left[(\gamma_1-\gamma_2)\tau-\delta T+\Phi\right]$$

$$-\frac{1}{2}\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(1+\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos\left[(\gamma_1+\gamma_2)\tau+\delta T-\Phi\right]$$

$$+\frac{1}{2}\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(1+\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos\left[(\gamma_1-\gamma_2)\tau+\delta T-\Phi\right]$$

$$-\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)-\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\cos\gamma_1\tau+\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)-\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\cos\gamma_2\tau$$

$$+\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos(\gamma_1\tau+\delta T-\Phi)-\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos(\gamma_1\tau-\delta T+\Phi$$

$$+\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos(\gamma_2\tau+\delta T-\Phi)-\frac{E_1\,E_2}{\gamma_1\,\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\,\gamma_2}\right)\cos(\gamma_2\tau-\delta T+\Phi$$

$$\left.-2\frac{\delta^2\,E_1\,E_2}{\gamma_1^2\,\gamma_2^2}\cos(\delta T-\Phi)\right\}$$

Dans cette équation la différence de phase ϕ entre les champs apparaît simplement comme un terme complémentaire qui s'ajoute à l'expression δT; ce dernier terme représente le déphasage, fonction de la fréquence, introduit par le passage des molécules d'une cavité à l'autre.

Nous cherchons la probabilité moyenne en faisant la moyenne sur les vitesses (II - 15). Comme la fonction I (x) (II-18), la fonction :

$$K(x) = \int_0^\infty y^3 \; e^{-y^2} \; \sin \frac{x}{y} \; dy \qquad \text{(II-30)}$$

a été tabulée par Ramsey.

Nous trouvons (Fonction II)

$$
\begin{aligned}
S = \frac{|\mu_{pq}|^2 I_o}{4\hbar^2}\Bigg\{ & \frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)+\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)-\left[\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)+\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\right] I\left(\frac{(\gamma_1+\gamma_2)l}{\alpha}\right) \\
& -\left[\frac{E_1}{\gamma_1^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)+\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\right] I\left(\frac{(\gamma_1-\gamma_2)l}{\alpha}\right) - 2\left[\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)-\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\right] I\left(\frac{\gamma_1 l}{\alpha}\right) \\
& + 2\left[\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1-\frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right)-\frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1+\frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right)\right] I\left(\frac{\gamma_2 l}{\alpha}\right) \\
& - \cos\Phi\left[\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1-\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1+\gamma_2)l-\delta L}{\alpha}\right)\right. \\
& - \frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1-\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1-\gamma_2)l-\delta L}{\alpha}\right) \\
& + \frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1+\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1+\gamma_2)l+\delta L}{\alpha}\right) \\
& - \frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1+\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1-\gamma_2)l+\delta L}{\alpha}\right) \\
& - 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_1 l+\delta L}{\alpha}\right) + 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_1 l-\delta L}{\alpha}\right) \\
& - 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_2 l+\delta L}{\alpha}\right) + 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_2 l-\delta L}{\alpha}\right) \\
& \left. + 4\frac{\delta^2 E_1 E_2}{\gamma_1^2\gamma_2^2} I\left(\frac{\delta L}{\alpha}\right)\right] + \sin\Phi\left[\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1-\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{(\gamma_1+\gamma_2)l-\delta L}{\alpha}\right)\right. \\
& - \frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1-\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{(\gamma_1-\gamma_2)l-\delta L}{\alpha}\right) \\
& - \frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1+\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{(\gamma_1+\gamma_2)l+\delta L}{\alpha}\right) \\
& + \frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(1+\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{(\gamma_1-\gamma_2)l+\delta L}{\alpha}\right) \\
& + 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{\gamma_1 l+\delta L}{\alpha}\right) + 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{\gamma_1 l-\delta L}{\alpha}\right) \\
& + 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1}+\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{\gamma_2 l+\delta L}{\alpha}\right) + 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1\gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1}-\frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) K\left(\frac{\gamma_2 l-\delta L}{\alpha}\right) \\
& \left. - 4\frac{\delta^2 E_1 E_2}{\gamma_1^2\gamma_2^2} K\left(\frac{\delta L}{\alpha}\right)\right]\Bigg\}
\end{aligned}
$$

. Nous remarquons que cette fonction est symétrique par rapport aux amplitudes E_1 et E_2 des champs électriques.

B/ - Probabilité de transitions quand les amplitudes sont égales :

Nous voulons examiner la distorsion des courbes de résonance lorsque les champs sont tels que leurs amplitudes sont égales mais qu'ils présentent une différence de phase Φ

Nous avons : $E_1 = E_2 = E_o$

La probabilité moyenne devient: (fonction III)

$$\overline{P} = \frac{|\mu_{gp}|^2 E_o^2}{4\hbar^2} \left\{ \frac{E_o^2}{\gamma^2} \left(1 + 3\frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) - 2\frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) \times I\left(\frac{2\gamma l}{\alpha}\right) - 8\frac{\delta^2}{\gamma^2} I\left(\frac{\gamma l}{\alpha}\right) \right.$$

$$- \cos\Phi \left[\frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 - 2\frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) I\left(\frac{2\gamma l - \delta L}{\alpha}\right) - 2\frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 - 3\frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) I\left(\frac{\delta L}{\alpha}\right) \right.$$

$$+ \frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 + 2\frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) I\left(\frac{2\gamma l + \delta L}{\alpha}\right) - 4\frac{E_o^2}{\gamma^2}\frac{\delta}{\gamma}\left(1 + \frac{\delta}{\gamma}\right) I\left(\frac{\gamma l + \delta L}{\alpha}\right)$$

$$\left. + 4\frac{E_o^2}{\gamma^2}\frac{\delta}{\gamma}\left(1 - \frac{\delta}{\gamma}\right) I\left(\frac{\gamma l - \delta L}{\alpha}\right) \right]$$

$$+ \sin \left[\frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 - 2\frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) K\left(\frac{2\gamma l - \delta L}{\alpha}\right) \right.$$

$$- \frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 + 2\frac{\delta}{\gamma} + \frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) K\left(\frac{2\gamma l + \delta L}{\alpha}\right)$$

$$+ 4\frac{E_o^2}{\gamma^2}\frac{\delta}{\gamma}\left(1 + \frac{\delta}{\gamma}\right) K\left(\frac{\gamma l + \delta L}{\alpha}\right) + 4\frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 - \frac{\delta}{\gamma}\right) K\left(\frac{\gamma l - \delta L}{\alpha}\right)$$

$$\left. \left. + 2\frac{E_o^2}{\gamma^2}\left(1 - 3\frac{\delta^2}{\gamma^2}\right) K\left(\frac{\delta L}{\alpha}\right) \right] \right\}$$

Nous avons calculé et tracé les courbes pour quelques valeurs remarquables de Φ, en donnant aux paramètres les valeurs suivantes :

L = 1 mètre
E_o = 0,1 volt par mètre

(ces deux paramètres correspondent à une bonne résolution des composantes hyperfines

La figure 27 représente la courbe de Ramsey pour quelques valeurs particulières de la différence de phase Φ et pour une raie simple. Le tracé des courbes, pour ces valeurs respectives, appelle les remarques suivantes:

a/ $\Phi = 0$, la courbe correspond à la courbe de Ramsey déjà trouvée dans la premier cas; la fréquence de résonnance correspond au maximum absolu.

b/ $\Phi = \Pi/2$, la courbe f_1 est du type dispersion, elle possède un maximum et un minimum aux fréquences correspondant aux points d'in - flexion de la courbe précédente.

c/ $\Phi = \Pi$, au lieu des minima de la courbe correspondant à $\Phi = 0$ nous trouvons des maxima et réciproquement. La fréquence de résonance correspond au minimum central.

d/ $\Phi = \frac{3}{2}\Pi$, la courbe f_2, non représentée sur la figure, serait semblable à la courbe f_1, calculée pour $\Phi = \Pi/2$, mais telle que

$$f_2(\delta) = f_1(-\delta)$$

Pour d'autres différences de phase, on obtiendrait des courbes intermédiaires.

Les figures 28 et 29 représentent la forme de la raie 3-3 correspondant aux cas où $\Phi = \Pi/2$ et $\Phi = \Pi$. Nous l'avons obtenues par la même méthode de superposition linéaire que précédemment.

C/ Distorsions produites par des amplitudes de champ électrique différentes :

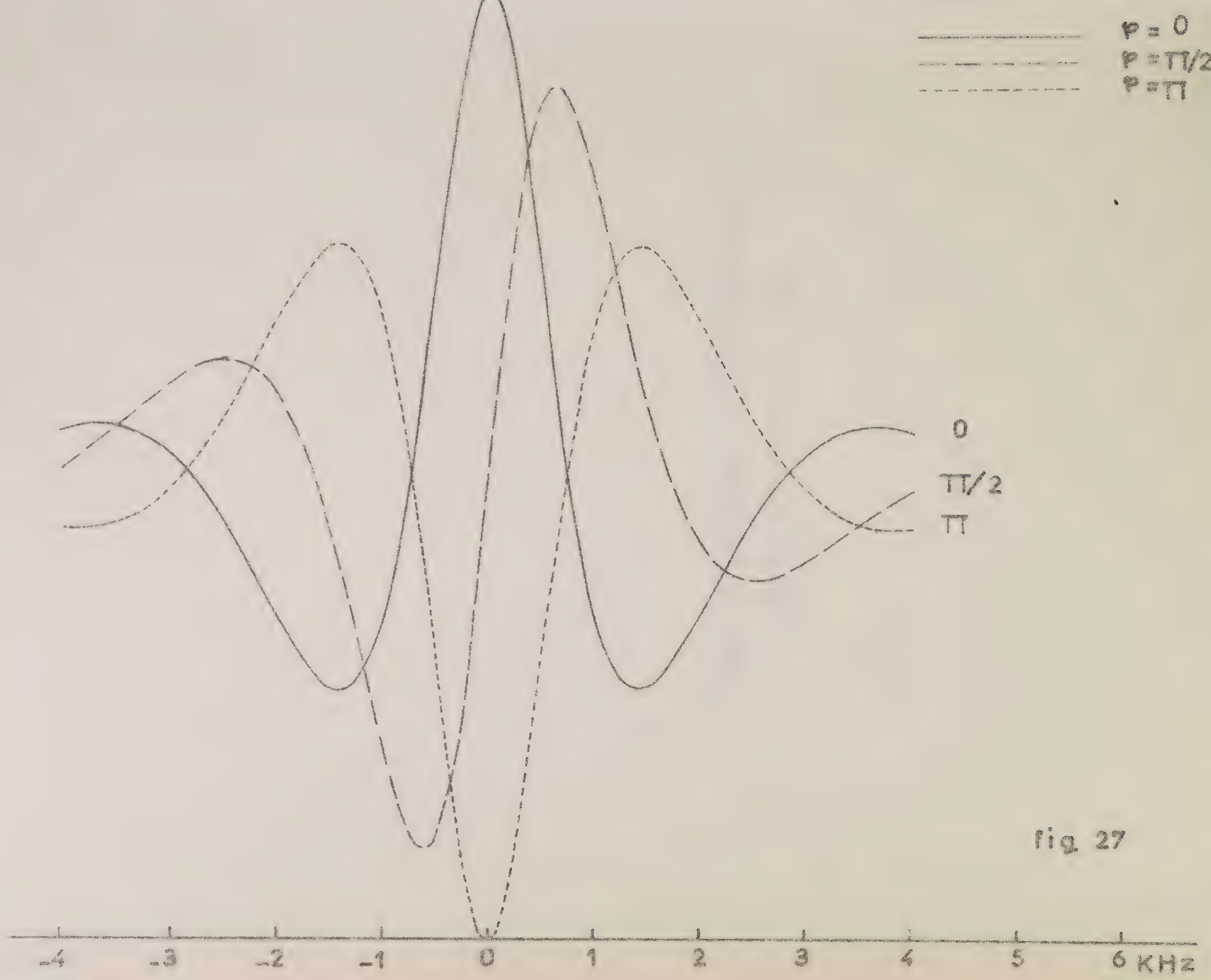


fig. 27

FORME DE LA RAIE DE RESONANCE

EN FONCTION DE LA DIFFERENCE DE PHASE

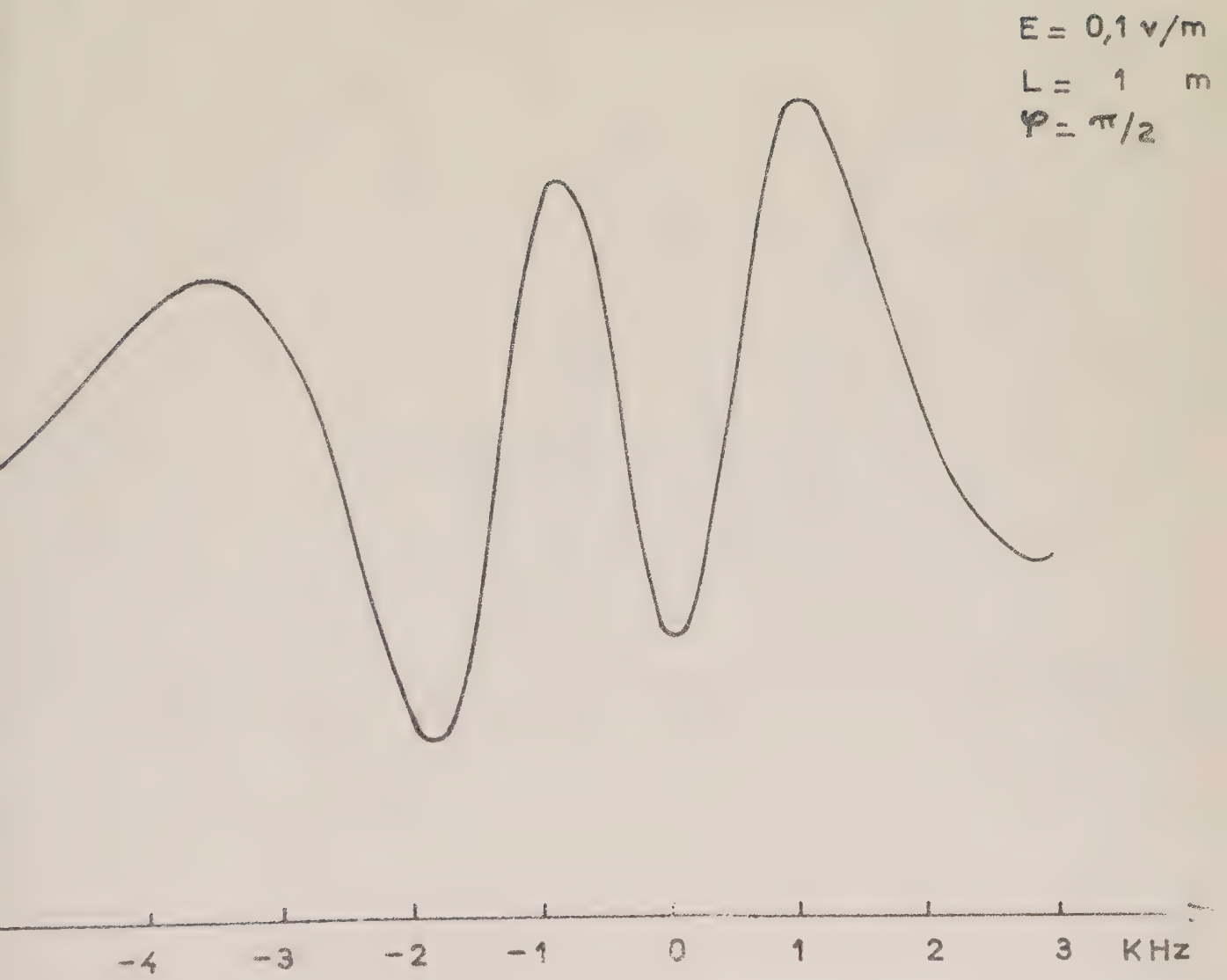


Fig. 28

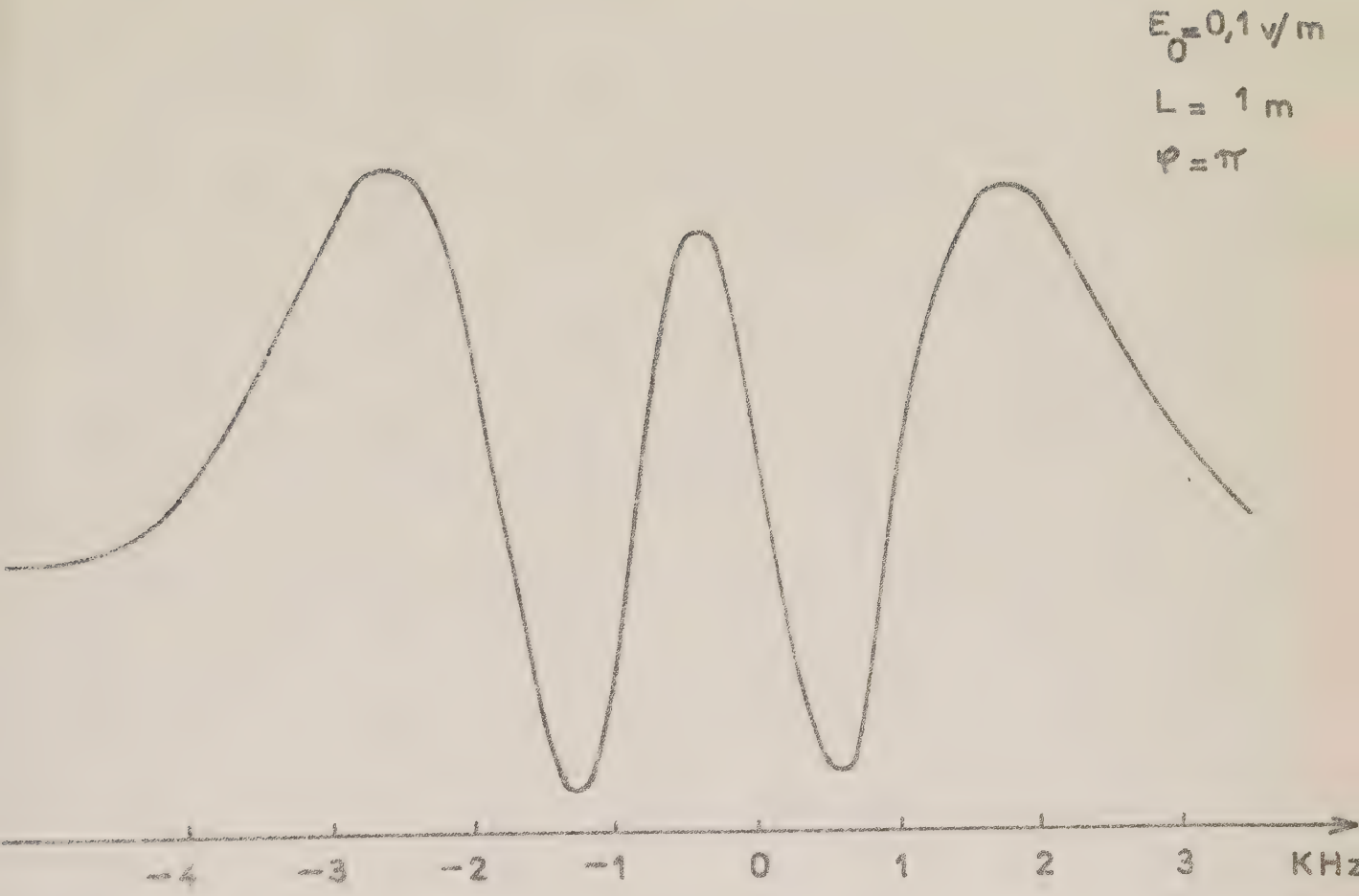


fig. 29

Nous faisons $\Phi = 0$ dans la fonction II. La probabilité moyenne devient:

$$= \frac{|\mu_{qp}|^2 I_o}{4h^2} \left[\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1 + \frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right) + \frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1 + \frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right) \right.$$

$$- \frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right) + \frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1 + \gamma_2)l}{\alpha}\right)$$

$$- \frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right) + \frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)l}{\alpha}\right)$$

$$- 2\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1 + \frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right) - \frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right) I\left(\frac{\gamma_1 l}{\alpha}\right)$$

$$+ 2\frac{E_1^2}{\gamma_1^2}\left(1 - \frac{\delta^2}{\gamma_2^2}\right) - \frac{E_2^2}{\gamma_2^2}\left(1 + \frac{\delta^2}{\gamma_1^2}\right) I\left(\frac{\gamma_2 l}{\alpha}\right)$$

$$- \frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(1 - \frac{\delta}{\gamma_1} - \frac{\delta}{\gamma_2} + \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1 + \gamma_2)l - \delta L}{\alpha}\right)$$

$$+ \frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(1 - \frac{\delta}{\gamma_1} + \frac{\delta}{\gamma_2} - \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)l - \delta L}{\alpha}\right)$$

$$- \frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(1 + \frac{\delta}{\gamma_1} + \frac{\delta}{\gamma_2} + \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1 + \gamma_2)l + \delta L}{\alpha}\right)$$

$$+ \frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(1 + \frac{\delta}{\gamma_1} - \frac{\delta}{\gamma_2} - \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)l + \delta L}{\alpha}\right)$$

$$+ 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2} + \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_1 l + \delta L}{\alpha}\right) - 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_2} - \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_1 l - \delta L}{\alpha}\right)$$

$$+ 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1} + \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_2 l + \delta L}{\alpha}\right) - 2\frac{E_1 E_2}{\gamma_1 \gamma_2}\left(\frac{\delta}{\gamma_1} - \frac{\delta^2}{\gamma_1\gamma_2}\right) I\left(\frac{\gamma_2 l - \delta L}{\alpha}\right)$$

$$\left. - 4\frac{\delta^2 E_1^2 E_2^2}{\gamma_1^2 \gamma_2^2} I\left(\frac{\delta L}{\alpha}\right) \right]$$

Nous avons calculé et tracé deux courbes pour une seule raie de résonance (figures 30 et 31). Elles correspondent à des amplitudes différentes dans les deux cavités, l'une pour E_1 = 0,1 v/m, E_2 = 0,5 v/m, l'autre pour E_1 = 0,1 v/m, E_2 = 1 v/m. Nous voyons que la raie est altérée mais reste symétrique par rapport à la fréquence centrale. Une différence d'amplitude entraîne un dédoublement symétrique de la raie de résonance principale. Ce dédoublement est fonction croissante de l'écart entre les amplitudes respectives des deux champs. Puisque cette distorsion est symétrique par rapport à la fréquence centrale, la fréquence de résonance peut être déterminée sans risque d'erreur.

FORME D'UNE RAIE SIMPLE

POUR DES AMPLITUDES DE CHAMP ELECTRIQUE DIFFERENTES

$E_1 = 0{,}1$ v/m

$E_2 = 0{,}5$ v/m

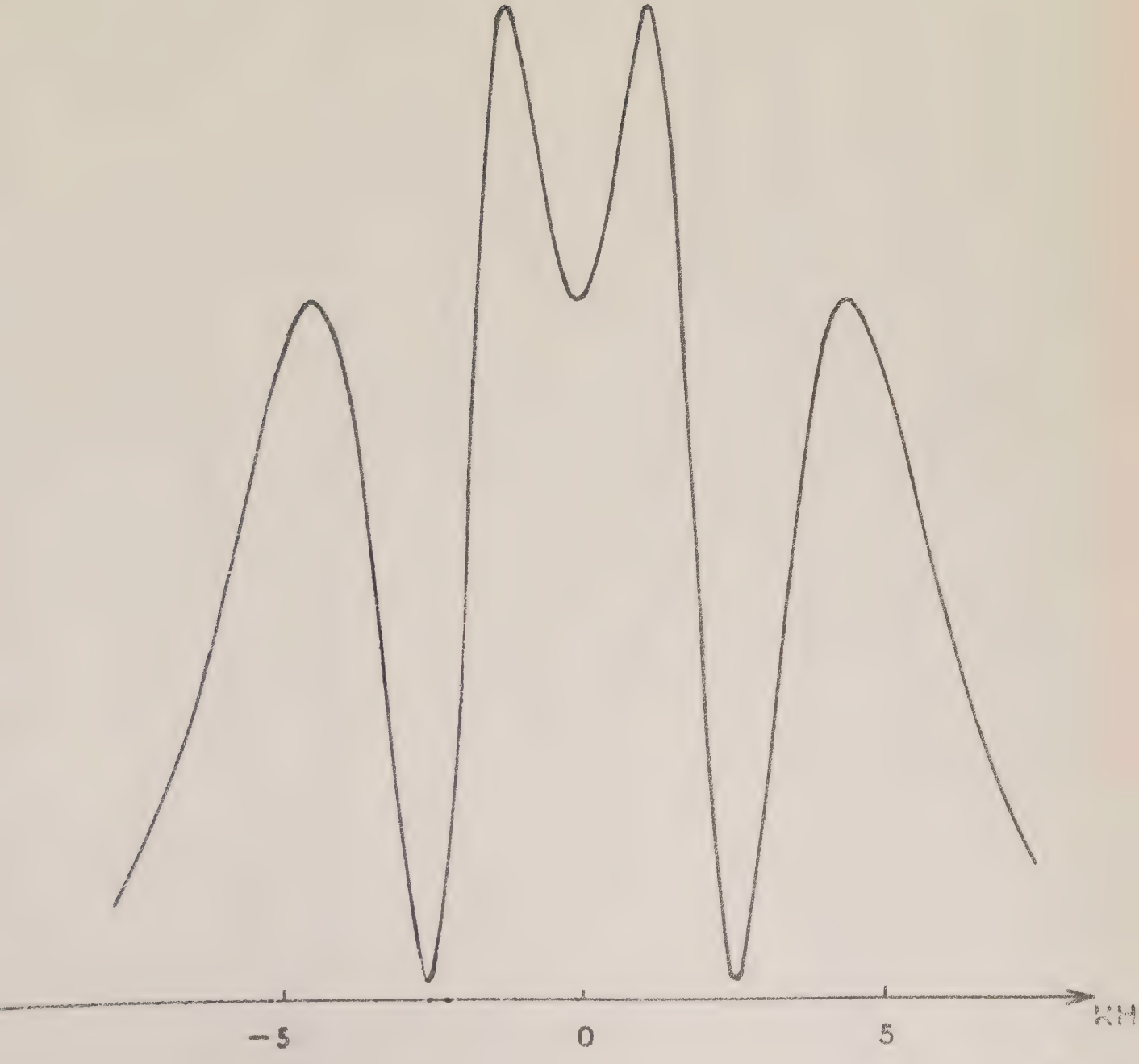


fig 30

$E_1 = 0{,}1$ v/m

$E_2 = 1$ v/m

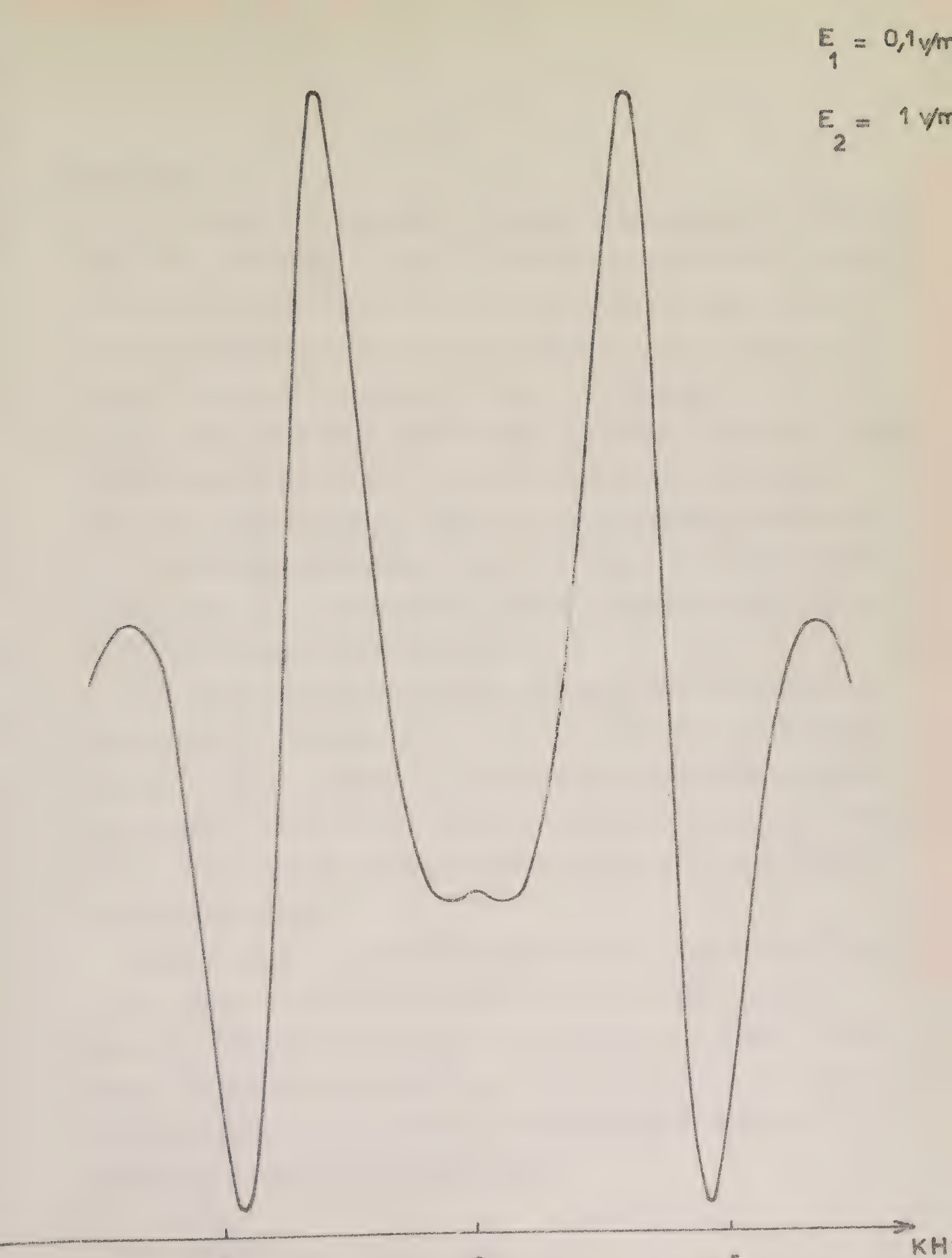


fig. 31

Conclusion :

Les résultats permettent de prévoir les conditions optimales dans lesquelles il faut se placer pour séparer les composantes de la raie 3-3. La forme d'une raie simple obtenue avec un système de LAMOT présente la particularité d'avoir une aile de réponse principale entourée de raies de réponses secondaires. Lorsque nous superposons simultanément les trois composantes, l'une, correspondant à $F_1 = 2$ est si faible qu'elle n'a pratiquement aucun rôle sinon d'élargir légèrement la composante correspondant à $F_1 = 4$. Le spectre contient alors deux raies qui sont partiellement ou totalement résolues. Les raies secondaires sont situées de part et d'autre de ces deux raies.

Les conditions de résolution pourraient être améliorées en agissant sur la première , ou sur la longueur L. La résolution augmente lorsque v diminue, il serait donc intéressant de trouver un dispositif permettant de diminuer la vitesse moyenne des molécules, par exemple en brisant les vitesses et en ne gardant que les vitesses lentes.

D'autre part, la résolution du système à deux cavités croît avec la longueur d'interaction L. Se sont essentiellement des difficultés d'ordre expérimental qui limitent cet accroissement d'interaction. Des progrès pourront être faits dans cette voie lorsque seront réalisés des dispositifs supra-conducteurs permettant d'assurer une bonne directivité du jet.

L'expérience qui, d'une part, permettra de vérifier ces résultats expérimentalement, et d'autre part, servira à étudier l'effet Zeeman sur chacune des composantes résolues, est en cours de préparation.

BIBLIOGRAPHIE

1/ -J. BARDEEN and C.H. TOWNES
Physical Review vol.73 - 1948 p.97
Calculation of Nuclear Quadrupole Effects in Molecules

2/ - N.G.BASOV - V.S. ZUEV - K.K. SVIDZINSKI
Soviet Maser Research

3/ -H.B.G. CASIMIR
On the interaction between Atomic
Nuclei and Electrons.
TAYLOR'S TWEEDE GENOOTSCHAP, E.F. BOHN HARLEM 1936

4/ -F.COESTER
Physical Review - vol. 77 - 1950 - p.454

5/ -E.U. CONDON and G.H. SHORTLEY
The Theory of Atomic - Spectra p.76-77
Cambridge University Press

6/ -FANO - Journal Research of The National Bureau of Standards
Vol 40, 1948, p.215

7/ -WILLIAM E. GOOD
Physical Review, vol 70, 1946 p.213
The Inversion Spectrum of Ammonia

8/ -J.P. GORDON
Physical Review vol.99, 1955 p.1253
Hyperfine Structure in the Inversion Spectrum of $N^{14}H_3$

9/ -MOTOKAZU HIRONO
Journal of the Radio Research Laboratories, n° 27 - 1959
Analysis of Focuser for Maser Oscillators

10/ -J.M. JAUCH
Physical Review, vol.72, 1947 p.715
The Hyperfine, Structure and The STARK Effect of The
Ammonia Inversion Spectrum

11/ -C.K. JEN
The Zeeman Effect in Microwave Molecular Spectra
Physical Review, vol.74, 1948 p.1396

12/ -KUKOLICH
I. Molecular Beams

13/ -L.D. LANDAU and E.M. LIFSCHITZ
Quantum Mechanics- Non Relativistic Theory -
Pergamon Press,

14/ - N.F. RAMSEY
Molecular Beams - Oxford At The - Clarendon Press

15/ -N.F. RAMSEY
Nuclear Moment JOHN WILEY and Sons Inc., New-York

16/ -M.E. ROSE
Elementary Theory of Angular Momentum - New-York
JOHN WILEY and SONS

17/ -SHIMODA
Journal of The Physical - Society of Japan, Vol.12, p.1006

18/ -SIMMONS and GORDY
Structure of The Inversion Spectrum of Ammonia
Physical Review vol.73, 1948, p.713

19/ - TOWNES and SCHAWLOW
Microwave Spectroscopy
Mc. GRAW HILL, BOOK Company

20/ -VAN VLECK - G.R. GUNTHER - MOHR - C.H. TOWNES
Physical Review, vol. 94, 1954, p.1191

21/ -VUYLSTECKE
Elementary Maser Theory
D. Van NOSTRAND Company, Inc. Princeton - NEW JERSEY